

Analyse des modèles de sous-maille par densité présumée en Simulation des Grandes Échelles

Antoine Moreau^a, Marc Elmo^b, Jean-Pierre Bertoglio^a

^a LMFA, UMR CNRS 5509, École centrale de Lyon, 36, avenue Guy de Collongue, 69130 Ecully, France

^b CEA Grenoble, DEN/DTP/SMTH/LDTA, 17, rue des Martyrs, 38054 Grenoble cedex 9, France

Reçu le 10 mai 2003 ; accepté après révision le 5 novembre 2003

Présenté par Sébastien Candel

Résumé

On s'intéresse à la modélisation des termes de réaction en Simulation des Grandes Échelles d'écoulements turbulents. La densité de sous-maille est souvent approchée dans ce cadre par une loi beta. Les estimateurs optimaux pour ce problème sont étudiés. Ils montrent que le choix des lois beta est justifié. L'essentiel de l'erreur commise provient en effet du choix des paramètres fondamentaux du modèle. Nous montrons ainsi que les estimateurs optimaux constituent un outil pertinent pour l'exploration des modèles de sous-maille et la recherche de pistes pour des améliorations futures. *Pour citer cet article : A. Moreau et al., C. R. Mecanique 332 (2004).*

© 2003 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Analysis of presumed density subgrid models for Large-Eddy Simulation. Subgrid models for the reaction terms in Large Eddy Simulation of turbulent flows are studied. The subgrid density is commonly approximated by a beta law. The optimal estimates for this problem are investigated. This shows that the choice of beta distributions is well founded. The largest error comes from the choice of the fundamental parameters of the model and not from the shape of the distribution itself. It is thus shown that the optimal estimates are a relevant tool for the investigation of subgrid modelling and the identification of directions for future improvements. *To cite this article: A. Moreau et al., C. R. Mecanique 332 (2004).*

© 2003 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Turbulence ; Scalaire passif ; Sous-maille ; Loi beta

Keywords: Turbulence; Passive scalar; Subgrid; Beta distribution

Adresse e-mail : berto@mecaflu.ec-lyon.fr (J.-P. Bertoglio).

Abridged English version

Introduction

Our study deals with the Large Eddy Simulation (LES) [1] of turbulent reacting flows. The concentration of a passive scalar $c(\vec{x})$ is considered and the large scales, denoted by \bar{c} , are defined by applying a box filter (Eq. (2)). The model problem for reacting flows is to estimate a filtered reaction rate $\overline{f(c)}$ when only the large scales of the scalar field are known [2,3].

Subgrid density modelling

The strategy of Cook and Riley [2] consists in modelling the subgrid density of the scalar $d_s(\Gamma) = \overline{\delta(\Gamma - c)}$ instead of attempting to model $\overline{f(c)}$ directly. Eq. (3) shows that once d_s is known, it is straightforward to deduce the turbulent reaction rate. The present Note is aimed at presenting a detailed analysis of the potentiality of the various models that one can construct following this route. In the original approach of [2], d_s is modelled by a beta function having the same mean \bar{c} and variance ($\sigma_s^2 = \bar{c} - \bar{c}^2$) (see Eq. (6) in which x and y respectively stand for the mean and the variance). In the literature several versions of the model exist, differing by the way the beta function is parameterised. In the ideal case where the subgrid variance is known, the beta function is parameterised by $\pi_1 = \{\bar{c}, \sigma_s^2 = \bar{c} - \bar{c}^2\}$. In a real LES, σ_s^2 must be expressed using a sub-model, that is to say that the set of parameters π must depend on the resolvable scales only, for example $\pi_2 = \{\bar{c}, \alpha\}$ in which α is the variance at a test filter level (denoted by $\hat{\cdot}$). In the following, we propose a way to independently assess the error committed by introducing the beta assumption and the error intrinsically related to the choice of the set of parameters π .

Optimal estimators and comparison with the previous model

For a given set π of parameters, there is a unique estimator of $\overline{f(c)}$ which minimize the mean square error, often used to measure the accuracy of a model [6]. This estimator is $\langle f(c) | \pi \rangle$. Eq. (5) shows that $\langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle$ is the best estimator of the subgrid density. In order to assess whether the “beta” hypothesis of Cook and Riley is efficient, we thus compared the best estimator for the subgrid density and for different sets of parameters, to a beta function with exactly the same mean (\bar{c}) and variance ($\langle \sigma_s^2 | \pi \rangle$). This was made using data generated by a 128^3 Direct Numerical Simulation of forced turbulence [7]. The results presented in Fig. 1 show that the agreement is excellent for the set π_1 . Larger discrepancies are observed when π_2 is considered, but the agreement remains acceptable (Fig. 2).

Table 1 provides a quantitative example of the errors committed for a reaction rate defined as $f(c) = (4c(1-c))^2$. Column 2 shows that the error associated with the beta function significantly increases when π_2 is used instead of π_1 , reflecting what was observed in Figs. 1 and 2. However, column 1 clearly demonstrates that the intrinsic error associated with the choice of parameters remains one order of magnitude larger than the error associated with the beta assumption. The conclusion is therefore that the beta distributions do fairly well what they can be expected to do, that is to say approximate the optimal estimator, but that as soon as a sub-model is introduced (π_2 or π_3 introduced instead of π_1) the error committed by the optimal estimator itself is large. The errors committed by $\langle \sigma_s^2 | \pi \rangle$ given in column 3 gives a measure of how relevant a set of parameters π is.

Conclusion

This Note demonstrates the interest of introducing the concept of optimal estimators for the assessment of subgrid models for a scalar field advected by turbulence. These estimators permit to distinguish between the supplementary error associated with the use of a beta distribution to model the subgrid density and the intrinsic error associated with the set of parameters chosen to parameterise the distributions. The supplementary error remains small compared to the intrinsic error, showing that the beta assumption is well founded. The effort in future modelling should then head towards a better estimation of the subgrid variance and the search for better large scale parameters.

1. Introduction

La simulation numérique des écoulements turbulents de fluides connaît actuellement des développements importants. Le but est de parvenir à reproduire de façon fiable certaines caractéristiques essentielles d'écoulements turbulents réels. La Simulation des Grandes Echelles (SGE) est basée sur une séparation entre grands et petits tourbillons [1]. Les grandes échelles sont résolues de manière directe. L'approche s'appuie alors sur l'hypothèse d'un comportement universel des petites échelles des champs de vitesse ou de scalaire. Elle présente un grand intérêt puisqu'il n'est en général pas possible de faire des simulations directes des situations rencontrées en pratique. La difficulté est cependant d'estimer correctement le comportement des petites échelles. Dans le cas d'une réaction chimique par exemple, les grandes échelles ne donnent que peu d'informations sur la proximité spatiale réelle des réactifs. C'est ce type de problème que nous allons étudier, en examinant finement le modèle de Cook et Riley [2], à l'aide la notion d'estimateur optimal, un outil pertinent pour l'étude fine des modèles.

2. Densité de sous-maille

Un scalaire modélisé par un champ $c(\vec{x})$ dans une turbulence incompressible obéit à une équation de la forme

$$\partial_t c + \partial_i (v_i c) = \chi \Delta c \quad (1)$$

Les grandes échelles du champ scalaire sont isolées par filtrage noté \bar{c} . Dans ce travail, nous utilisons la définition suivante :

$$\bar{c}(\vec{x}) = \frac{1}{h^3} \int_{D(\vec{x})} c(\vec{x}', t) d\vec{x}' \quad (2)$$

où $D(\vec{x})$ désigne un cube de d'exploration des modèles côté h centré en \vec{x} .

Dès lors qu'il s'agit d'étudier des réactions chimiques, un problème intervient de façon récurrente : prévoir $\overline{f(c)}$ à partir de \bar{c} . La quantité $f(c)$ peut être un taux de réaction ou la relation entre la concentration d'une espèce chimique et le scalaire conservé (fraction de mélange) dans le cas d'une réaction infiniment rapide [3].

La connaissance de la densité de sous-maille, définie par $d_s(\Gamma) = \overline{\delta(\Gamma - c)}$, permet de calculer cette grandeur [4] quelle que soit f , car

$$\overline{f(c)} = \int f(\Gamma) d_s(\Gamma) d\Gamma \quad (3)$$

Pour calculer $\overline{f(c)}$, la répartition spatiale précise du scalaire n'est donc pas nécessaire : connaître sa répartition en valeur suffit.

Cook et Riley ont proposé d'utiliser le jeu de paramètres $\pi_1 = \{\bar{c}, \sigma_s^2 = \overline{c^2} - \bar{c}^2\}$ pour estimer la densité de sous-maille. Ils ont supposé une forme particulière pour la densité, en s'inspirant de la modélisation classique de la densité de probabilité du scalaire [5]. La variance de sous-maille σ_s^2 ne peut cependant pas se déduire des seules grandes échelles. Aussi ont-ils proposé un sous-modèle, qui permet d'estimer σ_s^2 à partir d'une quantité grande échelle évaluée par double filtrage : la quantité $\alpha = \widehat{\overline{c^2}} - \widehat{\bar{c}}^2$, où $\widehat{\cdot}$ est un filtrage de taille caractéristique $2h$. Cette approche revient à introduire le jeu de paramètres $\pi_2 = \{\bar{c}, \alpha\}$. Une fois la densité de sous-maille estimée on la remplace par sa modélisation dans l'Éq. (3) pour estimer $\overline{f(c)}$. Dans ce qui va suivre, nous nous intéresserons tout d'abord au cas général d'un jeu de paramètres π quelconque, pour revenir plus loin sur les cas particuliers de π_1 et π_2 et du modèle de Cook et Riley.

3. Estimateurs optimaux

Pour mesurer l'écart entre la quantité à estimer $\overline{f(c)}$ et une fonction $g(\pi)$ d'un jeu de paramètres π (un estimateur de $\overline{f(c)}$), on utilise l'erreur quadratique [6] qui vérifie

$$\langle (\overline{f(c)} - g(\pi)) \rangle = \langle (\overline{f(c)} - \langle \overline{f(c)} | \pi \rangle) \rangle + \langle (\langle \overline{f(c)} | \pi \rangle - g(\pi)) \rangle \quad (4)$$

où $\langle \cdot \rangle$ est la moyenne statistique. L'erreur totale est ainsi la somme d'une erreur irréductible – liée au choix même de π car elle ne dépend pas de g – et d'une erreur supplémentaire liée à l'écart entre g et $\langle \overline{f(c)} | \pi \rangle$. Il existe donc une unique fonction de π qui minimise l'erreur : c'est la moyenne de $\overline{f(c)}$ conditionnée par le jeu de paramètres π . Nous appellerons cette fonction l'estimateur optimal pour f et π .

L'égalité

$$\langle \overline{f(c)} | \pi \rangle = \int f(\Gamma) \langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle d\Gamma \quad (5)$$

permet de dire qu'il existe un estimateur optimal pour la densité de sous-maille pour le jeu de paramètres π . Elle signifie en effet qu'utiliser $\langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle$ comme estimateur de la densité de sous-maille dans l'Éq. (5) revient à utiliser pour toute fonction f l'estimateur optimal. L'égalité (5) garantit également l'unicité de cet estimateur, car elle détermine à π fixé tous les moments de la fonction $\langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle$.

Nous avons utilisé des résultats de simulations numériques directes en 128^3 d'écoulements de scalaire passif dans une turbulence entretenue (voir [7]). Dans ces simulations, une injection périodique de scalaire frais permet d'obtenir une situation statistiquement stationnaire. La simulation a été menée avec un nombre de Schmidt égal à l'unité. Les résultats présentés ici sont issus d'un post-traitement des données des simulations directes (tests *a priori*). Le filtrage est effectué dans l'espace spectral, ce qui permet une application rigoureuse du filtre tel qu'il est défini en (2). Sa taille caractéristique h dans l'espace physique est de 8 mailles élémentaires.

Nous avons approché numériquement l'estimateur optimal pour une fonction f (ou pour σ_s^2) et un jeu de paramètres π donnés, par une fonction constante par morceaux (histogramme). Nous avons obtenu la densité de sous-maille, en tirant aléatoirement des points dans un cube $D(\vec{x})$, et en relevant la valeur de c en ce point. Dans le cas du filtre défini en (2), la densité de probabilité de cette variable aléatoire est la densité de sous-maille. Pour calculer $\langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle$ à π fixé, il nous a fallu moyenner les densités de sous-maille sur des cubes présentant des valeurs des paramètres identiques (en fait suffisamment proches [8]).

4. Comparaison entre les estimateurs optimaux et des fonctions β

Cook et Riley émettent l'hypothèse que l'on peut estimer la densité de sous-maille par une loi beta [2]

$$\beta(\Gamma; x, y) = \frac{\Gamma^{a-1} (1 - \Gamma)^{b-1}}{B(a, b)} \quad (6)$$

avec

$$a = x \left(\frac{x(1-x)}{y} - 1 \right) \quad \text{et} \quad b = \frac{a}{x} - a$$

Dans ce cas, x et y sont respectivement la moyenne et la variance de la fonction β .

Pour tester finement cette hypothèse, nous avons comparé directement le meilleur estimateur possible pour la densité de sous-maille, $\langle d_s(\Gamma) | \pi \rangle$, à une fonction β rigoureusement de même moyenne (\bar{c}) et de même variance ($\langle \sigma_s^2 | \pi \rangle$, i.e. σ_s^2 quand elle est connue). Nous avons fait ces comparaisons avec \bar{c} et σ_s^2 comme paramètres d'une part, puis avec \bar{c} et α .

Il en ressort que dans le cas où la variance de sous-maille est connue, la correspondance entre l'estimateur optimal et la fonction β est presque parfaite (Fig. 1). Ceci reste vrai même lorsque les fonctions β prennent des allures exotiques (elles peuvent diverger en 0 et en 1). Cependant, les densités réelles ne présentent pas nécessairement cette ressemblance (voir Fig. 4). Pour l'autre jeu de paramètres, si la ressemblance est nettement

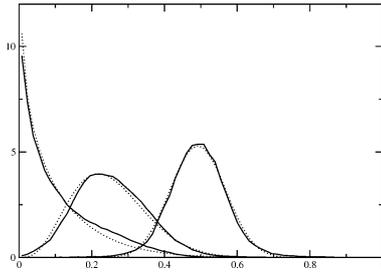


Fig. 1. Comparisons between $\langle d_s(\Gamma) | \bar{c}, \sigma_s^2 \rangle$ and $\beta(\Gamma; \bar{c}, \sigma_s^2)$.
 Fig. 1. Comparisons between $\langle d_s(\Gamma) | \bar{c}, \sigma_s^2 \rangle$ and $\beta(\Gamma; \bar{c}, \sigma_s^2)$.

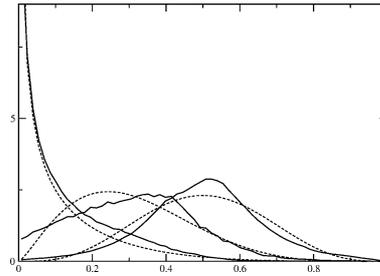


Fig. 2. Comparisons between $\langle d_s(\Gamma) | \bar{c}, \alpha \rangle$ and $\beta(\Gamma; \bar{c}, \langle \sigma_s^2 | \bar{c}, \alpha \rangle)$.
 Fig. 2. Comparisons between $\langle d_s(\Gamma) | \bar{c}, \alpha \rangle$ and $\beta(\Gamma; \bar{c}, \langle \sigma_s^2 | \bar{c}, \alpha \rangle)$.

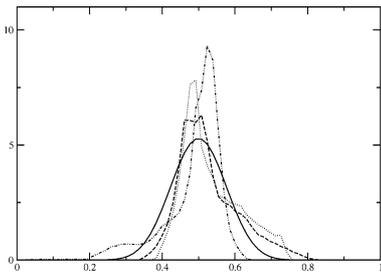


Fig. 3. Comparisons between a β law (solid line) and several arbitrary chosen subgrid densities, of same mean and variance.
 Fig. 3. Comparisons between a β law (solid line) and several arbitrary chosen subgrid densities, of same mean and variance.

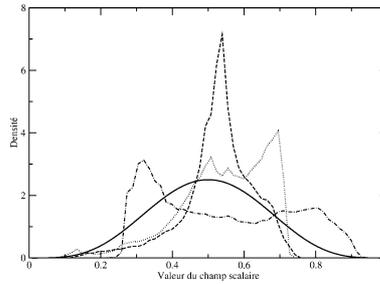


Fig. 4. Comparisons between a β law (solid line) and several arbitrary chosen subgrid densities, for the same values of \bar{c} and α , showing the dispersion of the subgrid variance.
 Fig. 4. Comparisons between a β law (solid line) and several arbitrary chosen subgrid densities, for the same values of \bar{c} and α , showing the dispersion of the subgrid variance.

conservée, même pour des allures exotiques, la correspondance n’est pas aussi bonne (voir Fig. 2). On peut conclure de ces comparaisons que dans le cas où la variance de sous-maille est connue, les estimateurs optimaux sont extrêmement proches des fonctions β . Dans le cas où cette variance est estimée, cette hypothèse reste nettement valable, mais pas aussi justifiée.

Nous voulions de plus savoir dans quelle mesure exactement l’hypothèse d’une forme de fonction β pour l’estimateur optimal de la densité pouvait contribuer à l’erreur commise sur l’estimation de $\overline{f(c)}$. Notre choix pour f s’est porté sur $f(c) = (4c(1 - c))^2$, qui représente un taux de réaction plausible [6]. En supposant pour l’estimateur optimal de la densité de sous-maille une loi β , on génère l’estimateur de $\overline{f(c)}$ suivant :

$$g_f(\pi) = \int f(\Gamma) \beta(\Gamma; \bar{c}, \langle \sigma_s^2 | \pi \rangle) d\Gamma \tag{7}$$

La comparaison des erreurs de $\langle \overline{f(c)} | \pi \rangle$ et de g_f renseigne donc purement sur la pertinence des lois β dans ce cadre. Dans le Tableau 1 sont présentés les résultats pour trois jeux de deux paramètres. Chaque jeu est constitué de \bar{c} et d’un second paramètre pris parmi σ_s^2 , α ou $\varepsilon_{\bar{c}} = (\partial_i \bar{c})^2$. Pour chaque jeu sont présentées des erreurs normalisées par la variance de la quantité estimée (qui représente l’erreur commise quand on estime une quantité par sa moyenne). Dans la première colonne, on trouve l’erreur associée à l’estimateur optimal, dans la deuxième l’erreur supplémentaire commise par g_f par rapport à l’estimateur optimal et dans la troisième l’erreur commise par l’estimateur optimal de la variance de sous-maille.

L’erreur supplémentaire due à l’hypothèse beta peut sembler importante lorsque la variance de sous-maille est connue. On pourrait penser qu’une amélioration future du modèle passerait par la recherche de fonctions

Tableau 1
Erreurs commises par différents estimateurs

Table 1
Quadratic errors for several estimates

Paramètres	Erreur de $\langle \overline{f(c)} \pi \rangle$	Erreur supplémentaire $g_f(\pi)$	Erreur de $\langle \sigma_s^2 \pi \rangle$
$\pi_1 = \{\bar{c}, \sigma_s^2\}$	$7,76 \times 10^{-3}$	$3,64 \times 10^{-3}$	0
$\pi_2 = \{\bar{c}, \alpha\}$	$5,885 \times 10^{-2}$	$5,05 \times 10^{-3}$	0,237
$\pi_3 = \{\bar{c}, \varepsilon_{\bar{c}}\}$	$5,03 \times 10^{-2}$	$2,2 \times 10^{-3}$	0,194

déterminées par des paramètres supplémentaires (comme \bar{c}^4). Il convient de relativiser cette impression, en premier lieu parce que les petites erreurs sont très sensibles. Ensuite, parce que dès qu'interviennent des paramètres grandes échelles comme α ou $\varepsilon_{\bar{c}}$, l'erreur liée à l'hypothèse beta devient négligeable. Et ceci dans le cas où l'on suppose connu l'estimateur optimal de la variance de sous-maille. Ce n'est évidemment pas le cas en général et c'est une source d'erreur importante. Il est sans doute plus efficace de vouloir diminuer l'erreur en approchant au mieux σ_s^2 et en cherchant de nouveaux paramètres grandes échelles que d'abandonner les lois beta.

Le fait que l'hypothèse beta semble bien fondée met en lumière une sorte de « connexion » entre l'estimateur optimal de la variance de sous-maille et l'estimateur optimal de $\overline{f(c)}$ quelle que soit f . On remarque justement que plus l'erreur est grande sur l'estimation de σ_s^2 pour un jeu de paramètres, moins ce jeu de paramètres est efficace pour approcher $\overline{f(c)}$ – avec ou sans loi β .

5. Conclusion

Nous avons voulu formaliser un problème de fermeture en montrant l'existence et l'unicité d'estimateurs optimaux pour $\overline{f(c)}$ ou la densité de sous-maille, d_s . L'étude de ces estimateurs nous a permis de conclure que les fonctions β sont un excellent choix pour la modélisation de d_s . Dans le cas où la variance de sous-maille σ_s^2 est supposée connue, les lois β sont peut-être même le meilleur choix possible. Les lois β permettent de générer des estimateurs proches des estimateurs optimaux à partir d'un estimateur de la variance de sous-maille. Quand σ_s^2 est estimée, les estimateurs optimaux commettent des erreurs qui, comparées à celle commises par les modèles usuels, paraissent modestes. Quand σ_s^2 est connue, les erreurs calculées sont même très petites. En général, meilleure est l'estimation de σ_s^2 , meilleure est la qualité des estimateurs générés. L'erreur commise par la quantité $\langle \sigma_s^2 | \pi \rangle$ est donc une mesure de la pertinence d'un jeu de paramètres. Nos résultats montrent ainsi que les paramètres \bar{c} et $\varepsilon_{\bar{c}}$ sont plus pertinents que \bar{c} et α . Des efforts futurs devront sans doute tendre vers une meilleure estimation de σ_s^2 , que ce soit en approchant au mieux l'estimateur optimal de σ_s^2 pour \bar{c} et α , ou bien en cherchant des paramètres plus efficaces encore. Les estimateurs optimaux nous semblent avoir un rôle à jouer dans cette démarche en tant qu'outils d'exploration des modèles.

Références

- [1] M. Lesieur, O. Métais, New trends in large-eddy simulations of turbulence, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 28 (1996) 45–82.
- [2] A.W. Cook, J.J. Riley, A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows, *Phys. Fluids* 6 (8) (1994) 2868–2870.
- [3] J. Jimenez, A. Liñan, M.M. Rogers, F.J. Higuera, A priori testing of subgrid models for chemically reacting non-premixed turbulent shear flows, *J. Fluid Mech.* 349 (1997) 149–171.
- [4] S.B. Pope, Pdf methods for turbulent reactive flows, *Prog. Energy Combust. Sci.* 11 (1985) 119–192.
- [5] C.K. Madnia, P. Givi, DNS and LES of reacting homogeneous turbulence, in: *Large Eddy Simulations of Complex Flows*, Cambridge University Press, 1993.
- [6] C. Wall, B.J. Boersma, P. Moin, An evaluation of the assumed beta probability density function subgrid-scale model for large eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion with heat release, *Phys. Fluids* 12 (10) (2000) 2522–2529.
- [7] M. Elmo, A. Moreau, J.P. Bertoglio, V.A. Sabel'nikov, Mixing in isotropic turbulence with scalar injection and applications to subgrid modeling, *Flow, Turb. Combust.* 65 (2000) 113–131.
- [8] A. Moreau, Thèse de doctorat, à paraître.