

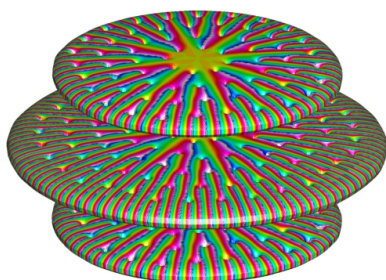
## Habilitation à diriger des recherches

Spécialité : Mathématiques appliquées

présentée par

**Ionut Danaila**

# Tourbillons en fluides et superfluides : une exploration numérique



Soutenue le 4 décembre 2008 devant le jury composé de

<b>C. F. Barengi</b>	<b>(rapporteur)</b>	<b>(Newcastle University, UK)</b>
<b>P. Comte</b>	<b>(rapporteur)</b>	<b>(Université de Poitiers)</b>
<b>G.-H. Cottet</b>		<b>(Université Joseph Fourier, Grenoble)</b>
<b>J. Dalibard</b>		<b>(CNRS, Laboratoire Kastler Brossel)</b>
<b>Q. Du</b>	<b>(rapporteur)</b>	<b>(Pennsylvania State University, USA)</b>
<b>F. Hecht</b>		<b>(Université Pierre et Marie Curie)</b>
<b>B. Maury</b>		<b>(Université Paris Sud)</b>
<b>S. Serfaty</b>		<b>(Université Pierre et Marie Curie)</b>







## Note à l'attention du lecteur : comment utiliser la version électronique (fichier PDF) de ce document

Ce mémoire a été conçu comme un document de travail, entièrement navigable dans sa version électronique. Le fichier PDF permet, grâce aux liens (hypertexte), de se déplacer facilement dans différentes parties, retrouver une équation, une référence, et même lancer un navigateur internet avec un lien externe. De plus, il contient des animations (films) qui illustrent mieux que les traditionnelles images statiques les résultats présentés.

**Téléchargement :** le fichier PDF se trouve à l'adresse :

[http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr\\_ionut.pdf](http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr_ionut.pdf)

Si vous voulez visionner les films également, il faut télécharger l'archive suivante :

[http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr\\_all.tar.gz](http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr_all.tar.gz)

ou

[http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr\\_all.zip](http://www.ann.jussieu.fr/~danaila/zdownload/hdr_all.zip)

Après désarchivage, on obtient deux dossiers : **danaila\_hdr** avec le fichier principal **hdr\_ionut.pdf** et le dossier **danaila\_hdr\_films** contenant les films.

Il faut maintenant ouvrir le fichier **hdr\_ionut.pdf**, avec Acrobat Reader (Adobe Systems Incorporated) de préférence.

**Navigation : les liens sont marqués en rouge dans le fichier PDF.**

La lecture du fichier PDF est optimale avec Acrobat Reader, à partir de sa version 6. La navigation sera aisée si les boutons *Vue précédente* et *Vue suivante* sont présents dans la barre de navigation d'Acrobat Reader. Comme ceci n'est pas le cas dans la configuration par défaut, j'indique la procédure à suivre pour les inclure : il faut aller dans le menu

*Affichage* → *Barre d'outils* → *Ajouter des outils* (tout en bas)

et cocher dans *Barre d'outils navigation de pages* les cases pour *Vue précédente* et *Vue suivante*. Deux boutons (petites flèches dans un rond) seront insérés à côté de la navigation des pages. On peut maintenant reprendre facilement la lecture du document en utilisant le bouton *Vue précédente*, après avoir consulté une référence bibliographique, par exemple.

**Animations :** Les figures dont la légende commence par le mot clé (*Animation*) contiennent également un film qui illustre le résultat présenté. Pour voir les animations il suffit de cliquer sur l'image. La *projection* du film se déroulera à l'intérieur du fichier pdf, sans avoir à quitter sa lecture. Il y a une seule exception, le film à la page 15, qui sera lancé dans une fenêtre extérieure.

La lecture du fichier PDF a été testée avec succès en utilisant Acrobat 8, sous Windows XP et Mac OS.







# Présentation générale

Les contributions scientifiques présentées dans ce mémoire sont le résultat de mes activités de recherche récentes dans le domaine du calcul numérique. Elle sont groupées suivant deux thèmes majeurs d'application : la simulation des écoulements fluides classiques et la simulation des superfluides (condensats de Bose-Einstein). Les méthodes numériques utilisées pour chaque application sont également mentionnées dans le titre de chaque chapitre. Chaque partie finit par une présentation des travaux en cours et des perspectives de recherche.

De manière générale, chaque problème physique traité a nécessité l'étude et la mise en oeuvre de développements numériques spécifiques, ce qui explique la grande variété des méthodes présentées. Ces méthodes numériques ont été souvent portées du stade d'analyse théorique à l'implémentation dans des codes de calcul. Une attention particulière est accordée à l'analyse (numérique et physique) des résultats obtenus. J'essaie de prouver dans ce mémoire que l'effort fourni pour extraire d'une simulation des informations précises sur la physique peut apporter une satisfaction supplémentaire au numéricien, celle de voir ses équations et ses lignes de code se métamorphoser en banc expérimental.

Le mémoire est conçu comme un document de travail, avec des chapitres indépendants. Chaque chapitre commence par une fiche descriptive contenant le résumé et la portée des contributions apportées, les mots clés et les points forts de chaque activité, et, enfin, les publications et les collaborations engendrées. Les références bibliographiques à la fin du mémoire sont également séparées par chapitres. La présentation s'adresse aussi bien aux spécialistes qu'au lecteur désirant se faire une idée globale sur le sujet. Le texte inséré entre deux traits horizontaux contient des explications (parfois techniques) destinées à détailler certaines notions introduites ; l'ignorer n'est pas pénalisant pour la compréhension du sujet.

Un dernier point que j'aimerais souligner est l'importance que j'accorde au transfert des connaissances acquises en recherche vers l'enseignement. Dans les trois livres ([3], [2], [1]) écrits avec mes collègues, F. Hecht, O. Pironneau, M. Postel, P. Joly et S. M. Kaber, j'ai inclus, sous une forme simplifiée, des éléments présents dans ce mémoire (méthode de résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles, méthode d'éléments finis pour les EDP elliptiques, etc).

J'indique dans la suite quelques mots clés destinés à guider le lecteur.



- La première partie est dédiée à la simulation des écoulements fluides classiques.

L'écoulement de jet rond est l'application centrale du **Chapitre 1**, qui présente des simulations effectuées avec des codes résolvant les équations de Navier-Stokes incompressibles par des méthodes d'éléments spectraux ou de différences finies. Le principe de chaque méthode numérique est rappelé brièvement. Je commence ce premier chapitre par résumer les résultats des travaux de thèse, qui m'ont permis un premier contact avec la simulation numérique et l'analyse des tourbillons. Dans la continuité de ces travaux, je présente les résultats sur le contrôle de l'écoulement de jet libre. Des évolutions spectaculaires de cet écoulement (*jets bifurquants ou florissants*), mises en évidence par différentes expériences numériques, sont illustrées dans ce chapitre.

Le **Chapitre 2** présente les outils numériques et théoriques développés pour l'intégration des équations de Navier-Stokes compressibles. En particulier, une méthodologie de type domaine fictif (frontière immergée) permettant de simuler facilement des frontières en mouvement est décrite. L'application visée dans cette partie est la simulation numérique directe (DNS) et des grandes échelles (LES) de l'écoulement qui se développe dans un moteur à combustion interne. Sa réalisation passe par l'étude des cas plus académiques : l'interaction d'un couple de tourbillons avec des obstacles et la simulation de l'injection dans un moteur carré. La dernière partie de ce chapitre présente brièvement les sujets de recherche appliquée développés en collaboration avec l'industrie.

Dans le **Chapitre 3** je décris ma principale activité de recherche dans la simulation des écoulements fluides *classiques* : le développement des méthodes numériques pour les équations de Navier-Stokes incompressibles et à faible nombre de Mach. La spécificité de l'approche est l'utilisation des coordonnées cylindriques. La méthode numérique qui est à la base de mon code 3D JETLES est présentée en détail. Les résultats numériques sur l'évolution d'un tourbillon toroïdal (*vortex ring*) sont montrés. Les applications d'intérêt industriel, comme l'injection de carburant dans les moteurs Diesel, sont discutées dans le cadre du développement de ce code.

Les travaux en cours et les projets de recherche ayant comme principale application l'étude des écoulements fluides sont présentés dans le **Chapitre 4**. Ils concernent l'analyse numérique et mathématique de modèles de tourbillon toroïdal (*vortex ring*), l'analyse numérique et la modélisation de la zone de proche entrée d'une conduite, et, bien entendu, le développement du code JETLES pour simuler d'autres types d'écoulements (l'injection conique).



- La deuxième partie présente une activité de recherche complètement nouvelle pour moi : la simulation du système superfluide constitué par le condensat de Bose-Einstein. Elle est organisée en deux grands chapitres.

Le **Chapitre 5** introduit le problème physique et les configurations expérimentales de condensat de Bose-Einstein en rotation, réalisées au Laboratoire Kastler-Brossel de l'ENS. La notion de tourbillon quantique est discutée en détail, car différente de celle utilisée en fluides classiques. La modélisation du système par l'équation de Gross-Pitaevskii est la base du code numérique 3D BETI que j'ai développé pour calculer les états d'équilibre du condensat. C'est un des rares codes 3D qui existent actuellement pour ce genre de problème. La méthode numérique d'intégration en temps imaginaire est présentée en détail, ainsi que les étapes de la simulation numérique.

Les nombreux résultats numériques obtenus sont montrés dans le **Chapitre 6**. Les configurations simulées correspondent généralement aux expériences de condensat avec tourbillons (*vortex*) quantiques – d'autres configurations sont proposées à partir de l'analyse théorique des résultats. Une grande variété de formes de vortex est présentée, avec une analyse détaillée de leur structure 3D. Des diagnostics proches de ceux utilisés par les expérimentateurs sont développés afin de fournir l'information qui n'est pas disponible dans les expériences. L'accord, non seulement qualitatif, mais aussi quantitatif avec les expériences et la théorie mathématique est recherché dans la présentation de ce chapitre.

Le **Chapitre 7** résume les configurations actuellement à l'étude dans le domaine de la simulation de condensats de Bose-Einstein. Il s'agit de configurations nouvelles (condensat placé en pièges optiques) qui commencent à être explorées expérimentalement. Les développements numériques futurs des outils de simulation sont aussi présentés.

- La troisième partie regroupe les références bibliographiques, présentées séparément pour chaque chapitre.







# Publications et travaux

Les versions électroniques (fichiers pdf) des publications sont disponibles sur ma page personnelle

<http://www.ann.jussieu.fr/~danaila>

rubrique *Papers*.

Les titres ci-dessous marqués en rouge sont des liens directs vers ces fichiers.

## Livres

- I. Danaila, P. Joly, S. M. Kaber, M. Postel
- [O1] *An Introduction to Scientific Computing. Twelve Computational Projects Solved with MATLAB.*, **Springer**, 2007.
- I. Danaila, P. Joly, S. M. Kaber, M. Postel
- [O2] *Introduction au calcul scientifique par la pratique. 12 projets résolus avec Matlab.*, **Dunod**, Collection Science Sup : Masters et Ecoles d'Ingénieurs, Paris, 2005.
- I. Danaila, F. Hecht, O. Pironneau
- [O3] *Simulation numérique en C++*, **Dunod**, Collection Science Sup : Masters et Ecoles d'Ingénieurs, Paris, 2003.

- 
- [O4] Co-éditeur avec A. Blouza, S. M. Kaber, P. Joly, B. Luquin, F. Murat et M. Postel des **Actes du 23ème Congrès national d'analyse numérique**, ESAIM Proceedings, vol XI, EDP Sciences, Paris, 2002.

## Articles dans des revues et ouvrages spécialisés

- I. Danaila, J. Hélie
- [A1] *Numerical simulation of the postformation evolution of a laminar vortex ring*, **Physics of Fluids**, **20**, p. 073602(1–14), 2008.
- S. Benteboula, I. Danaila
- [A2] *Variable density vortex rings*,  
publié dans **Advances in Turbulence XI**,  
Editors J. M. L. M. Palma and A. Silva Lopes, Springer, p. 771, 2007.



- I. Danaila

[A3] *Three-dimensional simulations of quantized vortices in rotating Bose-Einstein condensates*, **Bulletin of the "Politehnica" University of Timisoara, Transactions on Mechanics**, **51**, p. 155-162, 2006.
- S. Benteboula, I. Danaila

[A4] *Simulation numérique de l'injection gaz-gaz à masse volumique variable*, publié dans **Défis thermiques dans l'industrie nucléaire**, Editions Société Française de Thermique, p. 521-525, 2006.
- O. El Ganaoui, C. Habchi, G. Bruneaux and I. Danaila

[A5] *Numerical simulation of an experimental gas-gas jet generated by single-hole diesel-like injection*, **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, **47**, p. 1011-1018, 2005.
- I. Danaila

[A6] *Three-dimensional vortex structure of a fast rotating Bose-Einstein condensate with harmonic-plus-quartic confinement*, **Physical Review A**, **72**, p. 013605(1-6), 2005.
- A. Aftalion, I. Danaila

[A7] *Giant vortices in combined harmonic and quartic traps*, **Physical Review A**, **69**, p. 033608(1-6), 2004.
- I. Danaila

[A8] *Vortex dipoles impinging on finite aspect ratio rectangular obstacles*, **Flow, Turbulence and Combustion**, **72**, p. 391-406, 2004.
- L.-C. Crasovan, V. M. Pérez-García, I. Danaila, D. Mihalache and L. Torner

[A9] *Three-dimensional parallel vortex rings in Bose-Einstein condensates*, **Physical Review A**, **70**, p. 033605(1-5), 2004.
- A. Aftalion, I. Danaila

[A10] *Three-dimensional vortex configurations in a rotating Bose Einstein condensate*, **Physical Review A** **68**, p. 023603(1-6), 2003.
- I. Danaila

[A11] *Numerical simulation of a rotating Bose Einstein condensate*, publié dans **Actes du CANUM**, 2003.



- I. Danaila, B. J. Boersma  
 [A12] *Direct numerical simulation of bifurcating jets*,  
**Physics of Fluids**, **12** (5), p. 1255–1258, 2000.
- I. Danaila, T. Baritaud  
 [A13] *Direct numerical simulation of IC engine flows using a boundary body-force method*, publié dans **Actes du CANUM**, 2000.
- I. Danaila, J. Dusek, F. Anselmet  
 [A14] *Nonlinear dynamics at a Hopf bifurcation with axisymmetry breaking in a jet*, **Physical Review E**, **57** (4), p. 3695–3698, 1998.
- I. Danaila, B. J. Boersma  
 [A15] *Mode interaction in a forced homogeneous jet at low Reynolds numbers*,  
 publié dans *Proceedings of the Summer Program 1998*, Center for Turbulence Research, Stanford University and NASA Ames, p. 141–158, 1998.
- I. Danaila, J. Dusek, F. Anselmet  
 [A16] *Nonlinear dynamics of Low Reynolds Number Round Jets : Periodic Attractors and Transition to Chaos*,  
 publié dans **Advances in Turbulence VII**,  
 Editor U. Frisch, Kluwer Academic Publishers, p. 105–108, 1998.
- I. Danaila, J. Dusek, F. Anselmet  
 [A17] *Coherent structures in a round, spatially evolving, unforced, homogeneous jet at low Reynolds numbers*,  
**Physics of Fluids**, **9** (11), p. 3323–3342, 1997.
- I. Danaila, J. Dusek, F. Anselmet  
 [A18] *Direct numerical simulations of the free, unsteady, round, unforced jet at low Reynolds numbers*,  
 publié dans **Direct and Large-Eddy Simulation II**, Editors J.-P. Cholle, P. R. Voke and L. Kleiser, Kluwer Academic Publishers, p. 1–10, 1997.
- I. Danaila, J. Dusek, F. Anselmet  
 [A19] *Space Structure of the Free, Unsteady, Round, Homogeneous Jet at Low Reynolds Numbers*,  
 publié dans **Advances in Turbulence VI**, Editors S. Gavrilakis, L. Machiels and P. A. Monkewitz, Kluwer Academic Publishers, p. 11–14, 1996.



- J. Dusek, Ph. Fraunié, C. Dauchy, I. Danaila  
*Secondary instabilities and transition to turbulence in wakes and jets*,  
[A20] publié dans **Computation of Three-Dimensional Complex Flows**,  
Editors M. Deville, S. Gavrilakis and I. L. Ryhming, Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, p. 78–87, 1996.

Codes de calcul développés
----------------------------

- Code **BETI** Origine : (code 3D que j’ai écrit intégralement),  
Equations : Schrödinger non-linéaire (propagation en temps imaginaire),  
Méthode : différences finies (schémas compacts),  
[Code 1] Schéma : Runge-Kutta (convectif) + Crank-Nicolson (diffusif),  
Utilisation : simulation 3D des condensats de Bose-Einstein en rotation,  
structure 3D des tourbillons quantiques.

- Code **JETLES** Origine : (code 3D que j’ai écrit intégralement),  
Equations : Navier-Stokes incompressibles, en coordonnées cylindriques,  
Méthode : différences finies, maillage structuré,  
[Code 2] Schéma : Runge-Kutta (convectif) + Crank-Nicolson (diffusif),  
Approche de la turbulence : simulation directe /simulation des grandes  
échelles,  
Utilisation : calcul 2D et 3D de jets ronds, tourbillons, instabilités.

- Code **NTMIX-BF** Origine : le code NTMIX de l’IFP,  
Equations : Navier-Stokes compressibles, en coordonnées cartésiennes,  
Méthode : différences finies, maillage structuré + domaines fictifs,  
[Code 3] Schéma : Runge-Kutta + schémas compacts à l’ordre 6,  
Approche de la turbulence : simulation directe /simulation des grandes  
échelles,  
Utilisation : calcul 2D et 3D des écoulements moteur, tourbillons.

Information scientifique et vulgarisation
---

- Le film (1.1) sur le développement d’un jet rond a été sélectionné pour  
[V1] faire partie de la nouvelle édition du CDrom *Multimedia Fluid Mechanics*,  
Cambridge University Press, 2008.
- Plusieurs des mes images de vortex (chapitre 6) dans les condensats de Bose-  
[V2] Einstein sont utilisées comme illustrations dans l’ouvrage de A. Aftalion,  
*Vortices in Bose-Einstein Condensates*, Birkhäuser, 2006.



[V3] Une image de vortex géant dans un condensat est sur la couverture du numéro spécial *Bose Einstein condensates : recent advances in collective effects*, CRAS de Physique, 2004.

[V4] Une image (1.6) de jet bifurquant est utilisée comme illustration dans l'ouvrage de P. Durbin et B. Pettersson Reif, *Statistical Theory and Modeling of Turbulent Flows*, John Wiley & Sons, 2000.

Rapports et manuels
---------------------

[R1] I. Danaila  
*Code JETLES. Simulations numériques directes (DNS) et des grandes échelles (LES) des écoulements incompressibles en coordonnées cylindriques.* Manuel du code JETLES, UPMC, 2008.

[R2] I. Danaila, S. Benteboula : *Etude numérique et théorique des structures tourbillonnaires dans une injection gaz-gaz. Simulations numériques directes avec les codes JETLES et AVBP.*, Rapport de contrat UPMC/Institut Français du Pétrole, 2004.

[R3] M. Ballestra, I. Danaila : *Etude numérique de la formation et de la dissipation des tourbillons créés par un jet conique monophasique*, Rapport de contrat UPMC/Institut Français du Pétrole, 2002.

[R4] I. Danaila : *Numerical Implementation of the Body-Force Method in the NTMIX Code*, Rapport interne de l'Institut Français du Pétrole, 2001.

[R5] I. Danaila, T. Baritaud  
*Large Eddy Simulations for Stratified Charge Engines. LES Engines Program.* Twelve-months periodic report. Institut Français du Pétrole, March 1999.







# Table des matières

Note à l'attention du lecteur : comment utiliser la version électronique (fichier PDF) de ce document . . . . .	i
<b>Présentation générale</b>	<b>iii</b>
<b>Publications et travaux</b>	<b>vii</b>
<b>I. Simulations d'écoulements fluides classiques</b>	<b>1</b>
<b>1. Méthodes d'éléments spectraux et de différences finies pour les équations de Navier-Stokes incompressibles : simulations d'écoulements de jet rond</b>	<b>3</b>
1.1. Méthode d'éléments spectraux et analyse faiblement non-linéaire : tourbillons dans le jet rond . . . . .	5
1.2. Méthode de différences finies en coordonnées sphériques : contrôle actif des <i>jets bifurquants</i> . . . . .	9
<b>2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur</b>	<b>13</b>
2.1. Méthode de frontière immergée et différences finies pour les équations de Navier-Stokes compressibles . . . . .	15
2.1.1. Simulation d'un écoulement moteur académique . . . . .	18
2.1.2. Interaction d'un couple de tourbillons avec un obstacle . . . . .	19
2.2. Évaluation de codes industriels (AVBP) et modélisation . . . . .	20
<b>3. Méthodes de différences finies pour la simulation d'écoulements fluides en coordonnées cylindriques : code JETLES</b>	<b>25</b>
3.1. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles	27
3.1.1. Système d'équations . . . . .	27
3.1.2. Discrétisation en temps : méthode à pas de temps fractionné .	28
3.1.3. Discrétisation spatiale : différences finies sur maillage décalé .	29
3.2. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach . . . . .	30
3.2.1. Système d'équations . . . . .	31
3.3. Simulation de l'évolution d'un tourbillon toroïdal . . . . .	34
3.3.1. Tourbillon toroïdal ( <i>vortex ring</i> ) . . . . .	34



3.3.2. Évolution du tourbillon toroïdal à masse volumique constante	36
3.3.3. Évolution du tourbillon toroïdal à masse volumique variable	39
<b>4. Travaux en cours et perspectives</b>	<b>41</b>
4.1. Analyse numérique et mathématique de modèles de vortex	41
4.2. Analyse numérique et modélisation de la zone de proche entrée d'une conduite	44
4.3. Développement de schémas numériques dans JETLES : simulation de l'injection conique	46
<b>II. Simulations de systèmes super-fluides : condensats de Bose-Einstein</b>	<b>47</b>
<b>5. Étude numérique de tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein</b>	<b>49</b>
5.1. Réalisations expérimentales du condensat de Bose-Einstein	51
5.2. Modèle théorique	53
5.3. Modèle numérique	55
<b>6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein</b>	<b>59</b>
6.1. Vortex unique dans un condensat en rotation	61
6.2. Vortex géant dans un condensat en rotation	64
6.2.1. Étude théorique	64
6.2.2. Comparaison avec les expériences	66
6.3. Vortex <i>exotique</i> dans un condensat sans rotation	69
<b>7. Travaux en cours et perspectives</b>	<b>71</b>
7.1. Étude mathématique et numérique du condensat placé dans un piège optique	71
7.2. Développement numérique du code de simulation BETI	73
<b>III. Bibliographie</b>	<b>75</b>



I

# **Simulations d'écoulements fluides classiques**







# 1. Méthodes d'éléments spectraux et de différences finies pour les équations de Navier-Stokes incompressibles : simulations d'écoulements de jet rond

## Présentation générale

---

Je présente dans ce chapitre mes toutes premières simulations d'écoulements fluides, réalisées pendant ma thèse et dans les deux années suivant mon arrivée au laboratoire Jacques-Louis Lions. Il s'agit de simulations tridimensionnelles (3D) utilisant des méthodes d'éléments spectraux (travaux de thèse, [Danaila, 1997](#)) et de différences finies ([Danaila and Boersma, 2000](#)) pour discrétiser les équations de Navier-Stokes incompressibles. À l'époque où les méthodes spectrales (avec leurs inhérentes conditions aux limites périodiques) dominaient dans le monde de la mécanique des fluides numérique, ces simulations se situent parmi les premières utilisant une approche spatiale (conditions aux limites d'entrée/sortie) pour étudier en 3D l'écoulement de jet rond.

Les outils numériques et théoriques développés pendant la thèse sont présentés de manière succincte. Ils m'ont permis une première analyse des structures (cohérentes) tourbillonnaires qui apparaissent dans les écoulements de type jet. Ces tourbillons apparaîtront tout au long de cette partie consacrée aux fluides classiques.

Dans la continuité de ces travaux, j'ai utilisé et développé de nouveaux codes de calcul, plus adaptés à ce type de configuration. Je présente dans ce chapitre les résultats obtenus avec un code de différences finies discrétisant les équations de Navier-Stokes incompressibles en coordonnées sphériques. Des évolutions spectaculaires (*jets bifurquants*) de l'écoulement 3D sont mises en évidence quand un forçage (contrôle actif) est appliqué à l'entrée.

Liés à ce sujet de recherche, les travaux de développement d'un code Navier-Stokes en coordonnées cylindriques seront présentés au chapitre [3](#).



## 1. *Éléments spectraux et différences finies pour les jets ronds*

**Mots clés :** éléments spectraux, différences finies, simulations 3D, équations de Navier-Stokes incompressibles, analyse de stabilité faiblement non-linéaire, modèle de Landau.

**Points forts :** simulations tridimensionnelles spatiales réalistes, analyse de Fourier des signaux conduisant aux modèles théoriques originaux.

**Publications :** articles : [A12], [A15]  
(pendant la thèse) : [A14], [A17], [A16], [A18], [A19], [A20].

**Collaborations :** B. J. Boersma (Université de Delft, Pays Bas),  
D. Parekh (Georgia Tech, USA),  
et mes directeurs de thèse  
F. Anselmet (IRPHE, Marseille),  
J. Dušek (Université Louis Pasteur, Strasbourg).

---



## 1.1. Méthode d'éléments spectraux et analyse faiblement non-linéaire : tourbillons dans le jet rond

Mon aventure dans le monde de la simulation numérique commence pendant ma thèse quand j'ai eu la chance de pouvoir utiliser le code Nekton développé à l'origine par Tony Patera (Patera, 1984). Ce code (disparu depuis du paysage numérique) utilisait une méthode d'éléments spectraux pour discrétiser les équations de Navier-Stokes incompressibles et était particulièrement adapté à l'étude des écoulements laminares en transition.

---

Il serait peut-être intéressant de donner quelques idées sur la méthode d'éléments spectraux qui est généralement moins connue que la méthode des éléments finis. Le domaine de calcul ( $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ) est discrétisé en *macro*-éléments  $(\mathcal{E}_k)_{k=1\dots K}$  de type éléments finis lagrangiens (seulement la continuité  $C^0$  est imposée). Les fonctions de base locales sont des polynômes d'ordre supérieur (typiquement  $N \geq 5$ )

$$\phi_{pql}^{(\mathcal{E}_k)} = h_p(\xi) h_q(\eta) h_l(\zeta), h \in \mathcal{P}_N \implies u(x, y, z)|_{(\mathcal{E}_k)} = \sum_{p,q,l=0}^N \hat{u}_{pql}^k \phi_{pql}^{(\mathcal{E}_k)}$$

où les coordonnées locales  $(\xi, \eta, \zeta)$  sont obtenues par la transformation du macro-élément dans le cube  $[-1, 1]^3$ . Les  $N^n$  points de collocation sont les nœuds d'un réseau local (orthogonal) ayant comme points de départ la subdivision (non équidistante) de chaque côté de l'élément en  $N - 1$  parties. L'erreur d'approximation est de l'ordre  $\mathcal{O}[K^{-N} \exp(-ct \cdot N)]$  (voir aussi Neitzel et al., 1995; Henderson and Karniadakis, 1995). Une bonne stratégie à adopter pour la discrétisation est de considérer des macro-éléments de taille relativement grande et des polynômes d'approximation d'ordre élevé. On combine de cette manière la grande précision des méthodes spectrales avec la facilité de la méthode d'éléments finis pour modéliser des configurations complexes.

---

L'originalité de l'approche numérique proposée venait du fait que les écoulements 3D se déstabilisaient *naturellement* à cause du faible bruit numérique introduit par la méthode quand de forts gradients de la solution sont présents à la jonction des



## 1. Éléments spectraux et différences finies pour les jets ronds

éléments spectraux. Dans le cas de l'écoulement de jet rond, ce bruit est introduit au voisinage de la buse d'injection et il est similaire au bruit inhérent aux dispositifs expérimentaux. J'ai ainsi réussi à simuler l'écoulement qui se développe (en espace et en temps) dans la zone de proche sortie d'un jet libre, pour de faibles nombres de Reynolds ( $Re = V_0 D/\nu < 500$ , où  $V_0$  est la vitesse d'injection,  $\nu$  la viscosité cinématique du fluide et  $D$  le diamètre de la buse).

La partie physique des résultats a été exploitée en analysant les structures cohérentes (tourbillons). Le scénario classique pour l'évolution de l'écoulement de jet à *grands nombres de Reynolds* est retrouvé dans notre simulation pour le nombre de Reynolds de 500 : enroulement des tourbillons de Kelvin–Helmholtz, appariement des anneaux de vorticit  (voir figure/animation 1.1), apparition de filaments longitudinaux et de jets latéraux. Une nouvelle phase du scénario, la reconnexion des anneaux dans des structures de type spirale est observée et analysée avant la transition vers l'état chaotique (voir Danaila et al., 1996a; Dusek et al., 1996b; Danaila et al., 1997a,b).

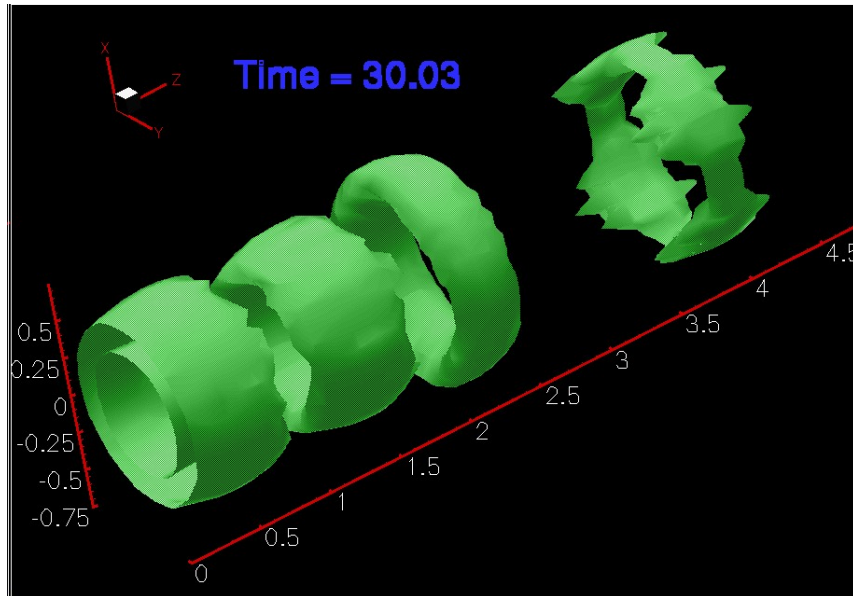


Figure 1.1.: (Animation) Appariement de tourbillons toroïdaux dans la zone de proche sortie d'un jet rond. Simulation Navier-Stokes avec une méthode d'éléments spectraux. Film sélectionné pour faire partie du CDrom *Multimedia Fluid Mechanics* (Homsy, 2008).

Une analyse de Fourier du champ fluctuant proche du seuil de l'instabilité primaire (quand l'écoulement laminaire devient instationnaire) a révélé la présence des structures de type hélicoïdal (figure 1.2). Déjà observé dans les expériences de laboratoire, ce changement de topologie des tourbillons (passage tore  $\rightarrow$  hélice) quand le nombre de Reynolds diminue, était alors confirmé numériquement pour la première fois (Danaila et al., 1997a).



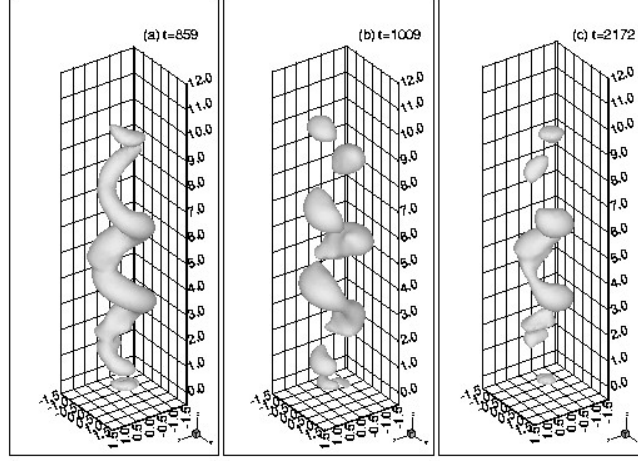


Figure 1.2.: Modes hélicoïdaux contra-rotatifs et le résultat de leur superposition.

D'un point de vue mathématique, nous étions tombés sur un cas très intéressant, celui d'un opérateur linéaire dont l'espace spectral est dégénéré. Plus en détail, en linéarisant les équations de Navier–Stokes en coordonnées cylindriques  $(r, \theta, z)$  (on peut consulter le chapitre 3 pour leur forme complète), l'opérateur obtenu,

$$\nabla_{m^2}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m^2}{r^2}, \quad (1.1.1)$$

dépend du carré du nombre d'onde azimuthal  $m$ . Par conséquent, si le problème linéaire de valeurs et vecteurs propres a comme solution la valeur propre  $\lambda(m^2)$  pour  $m = 1$ , il existe deux vecteurs propres associés, linéairement indépendants,  $\Phi_{\pm|m|} = \phi_{\pm|m|} \exp(\mp i|m|\theta)$ . C'est exactement le cas de notre écoulement, dominé par les modes hélicoïdaux  $m = \pm 1$ .

Pour des écoulements instationnaires avec une fréquence dominante ( $f = \omega/2\pi$ ), une description non-linéaire de l'instabilité peut être obtenue par une décomposition du champ fluctuant en série de Fourier (par exemple Van Dyke, 1975; Carte et al., 1995) :

$$\mathbf{v} - \mathbf{V} = \tilde{\mathbf{v}}'(r, \theta, z; t, s)|_{s=t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{c}_n(., s) e^{in\omega t}, \quad \text{avec } \mathbf{c}_n = \bar{\mathbf{c}}_{-n}, \quad (1.1.2)$$

où la variable temps a été séparée en deux parties :  $t$ , l'échelle rapide de la périodicité et  $s$  l'échelle lente prenant en compte la variation de l'amplitude de chaque mode pendant le développement de l'instabilité. Une idée intéressante (voir Dušek et al., 1994; Carte et al., 1995) est alors de remplacer les équations de Navier-Stokes par des équations d'évolution des coefficients Fourier  $\mathbf{c}_n$  qui dépendent de  $s$  et des variables d'espace. Dans notre cas, le champ fluctuant correspondant au mode instable



## 1. Éléments spectraux et différences finies pour les jets ronds

sélectionné par l'instabilité s'écrit sous la forme :

$$\tilde{\mathbf{v}}'(r, \theta, z; t, s) = [A_+(s) \phi_+(r, z) e^{-i\theta} + A_-(s) \phi_-(r, z) e^{i\theta}] e^{i\omega t}, \quad \text{avec } A_{\pm} \sim e^{\gamma t} \quad (1.1.3)$$

En utilisant une décomposition en double série de Fourier pour décrire le champ fluctuant :

$$\mathbf{v}'(r, \theta, z; t, s) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \mathbf{c}_{n,l}(r, z, s) e^{in\omega t} e^{-il\theta}, \quad \text{avec } \overline{\mathbf{c}_{n,l}} = \mathbf{c}_{-n,-l}, \quad (1.1.4)$$

nous avons obtenu (Danaila et al., 1998a,b) un modèle théorique original (modèle de Landau généralisé pour deux amplitudes complexes)

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{A}_+}{\partial s} = \gamma \tilde{A}_+ - \tilde{A}_+ (\tilde{C} |\tilde{A}_+|^2 + \tilde{D} |\tilde{A}_-|^2) - \tilde{A}_+ (\tilde{a} |\tilde{A}_+|^4 + \tilde{b} |\tilde{A}_+|^2 |\tilde{A}_-|^2 + \tilde{c} |\tilde{A}_-|^4), \\ \frac{\partial \tilde{A}_-}{\partial s} = \gamma \tilde{A}_- - \tilde{A}_- (\tilde{C} |\tilde{A}_-|^2 + \tilde{D} |\tilde{A}_+|^2) - \tilde{A}_- (\tilde{a} |\tilde{A}_-|^4 + \tilde{b} |\tilde{A}_-|^2 |\tilde{A}_+|^2 + \tilde{c} |\tilde{A}_+|^4), \end{cases} \quad (1.1.5)$$

où les coefficients sont exprimés formellement par projection des équations de Navier-Stokes. Ce modèle décrit l'évolution des instabilités dans tout écoulement dominé par deux modes hélicoïdaux contra-rotatifs  $\pm m \neq 0$  (jet rond, sillage derrière une sphère, etc). Dans le cas du jet rond, les mécanismes physiques de sélection et d'interaction entre les deux modes instables  $m = \pm 1$  sont fidèlement reproduits par le modèle (figure 1.3).

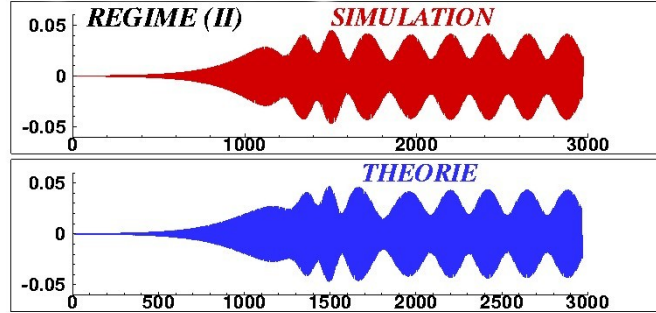


Figure 1.3.: Écoulement de jet rond dominé par deux modes hélicoïdaux contra-rotatifs  $\pm m \neq 0$ . Reconstruction du signal de vitesse azimutale  $V_\theta$  à partir du modèle théorique et comparaison avec la simulation numérique directe. Seulement l'enveloppe du signal est clairement visible, la période d'oscillation étant très petite par rapport à la durée du signal.



## 1.2. Méthode de différences finies en coordonnées sphériques : contrôle actif des jets bifurquants

Dans la suite de mes travaux de thèse, j'ai lancé un projet de recherche visant à simuler et expliquer le comportement d'une classe particulière de jets, les jets *bifurquants* ou *florissants*. Ces jets, obtenus par différentes techniques expérimentales (Lee and Reynolds, 1985; Parekh et al., 1988), montrent une augmentation spectaculaire de l'évasement et des propriétés de mélange (voir aussi Reynolds et al., 2003). La figure 1.4 montre un tel jet, appelé poétiquement *florissant* (*blooming jet* en anglais), car, semble-t-il, l'expérience fut réalisée au printemps. Ce projet, initié lors du *Summer*

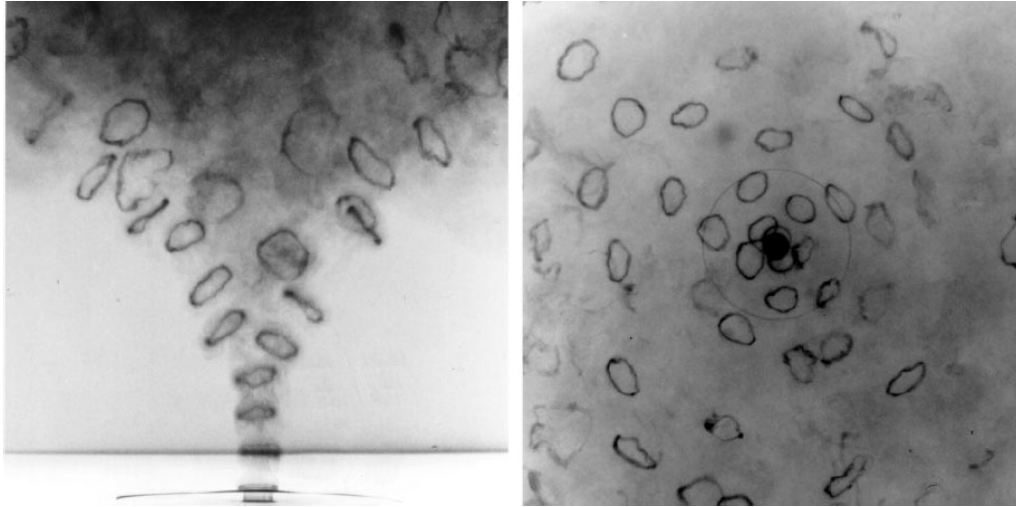


Figure 1.4.: Jet *florissant* obtenu expérimentalement par Lee and Reynolds (1985).

*Program 1998* au Center for Turbulence Research, Université de Stanford, a occasionné ma collaboration avec B. J. Boersma de l'Université de Delft, Pays Bas. Il a mis à ma disposition un code calcul discrétisant les équations de Navier-Stokes en coordonnées sphériques. Le code utilise des différences finies centrées sur un maillage décalé (voir le chapitre 3 pour les détails de cette technique). Le schéma d'intégration en temps étant explicite, le code a été parallélisé (MPI) permettant ainsi de simuler des écoulements 3D sur des maillages de taille importante. Je continue à utiliser actuellement ce code académique, que je développe et j'adapte pour simuler d'autres types d'écoulements (nous le retrouverons dans le chapitre 3 du présent mémoire).

L'idée d'utiliser les coordonnées sphériques pour simuler un écoulement de jet rond est assez originale. Le domaine de calcul (figure 1.5) est le résultat de l'intersection entre une couronne sphérique et un cône ayant comme sommet le centre de la sphère. L'avantage est que les lignes de maillage peuvent suivre *naturellement* l'évasement de l'écoulement de jet.



## 1. Éléments spectraux et différences finies pour les jets ronds

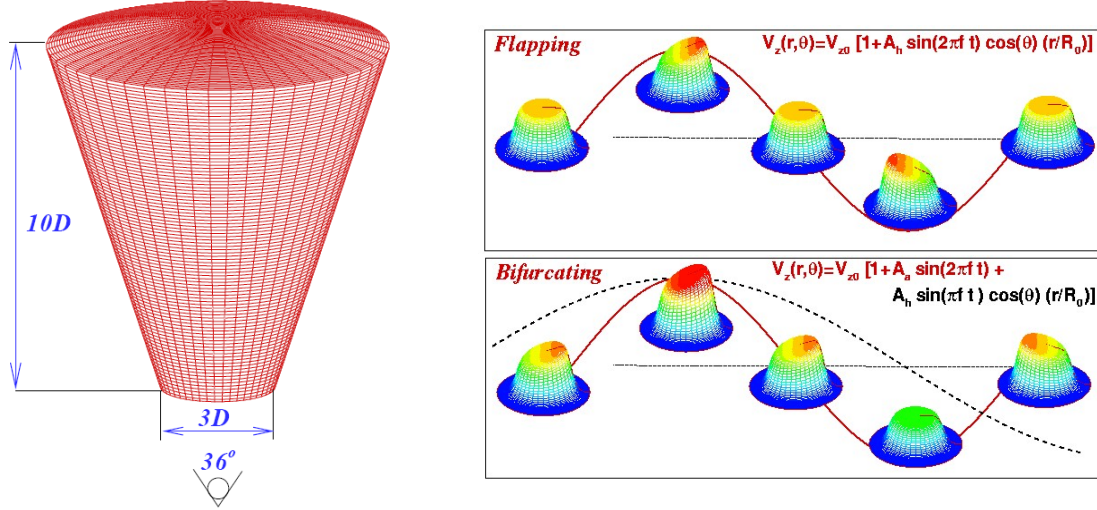


Figure 1.5.: Méthode de différences finies en coordonnées sphériques. Domaine de calcul 3D (maillage  $192 \times 128 \times 96$ ) et exemples de perturbation appliquée à l'entrée pour contrôler l'écoulement de jet.

Par une modélisation appropriée du forçage à la buse (figure 1.5), nous avons réussi à reproduire numériquement les caractéristiques des jets bifurquants observées expérimentalement (Danaila and Boersma, 1998, 2000). Le modèle de perturbation appliquée est la superposition des modes instables fondamentaux (axisymétrique,  $m = 0$  et hélicoïdaux  $m = \pm 1$ ) :

$$V_z = 1 + \sum_{m=0, \pm 1} A_m \sin(2\pi f_m t - m\theta_c + \Phi_m) \left(\frac{2r_c}{D}\right)^{|m|}. \quad (1.2.1)$$

Les coefficients du modèle sont fournis par l'analyse de stabilité linéaire et par les expériences de Parekh et al. (1988). Pour des valeurs bien définies des paramètres de forçage, le jet se sépare en deux branches distinctes, formant un jet *bifurquant* (figure 1.6).

Il est à souligner pour conclure que le sujet présenté dans cette section a ouvert de nouvelles perspectives de recherche (voir le travail de Hilgers and Boersma, 2001 sur l'optimisation des paramètres du modèle 1.2.1) et qu'il reste toujours d'actualité (voir le papier de synthèse de Reynolds et al., 2003 et les expériences récentes de Suzuki et al., 2004). Je remarque d'ailleurs que le jet *florissant* (figure 1.4) n'a jamais été obtenu numériquement par une simulation Navier-Stokes – c'est un défi que je compte relever un jour !



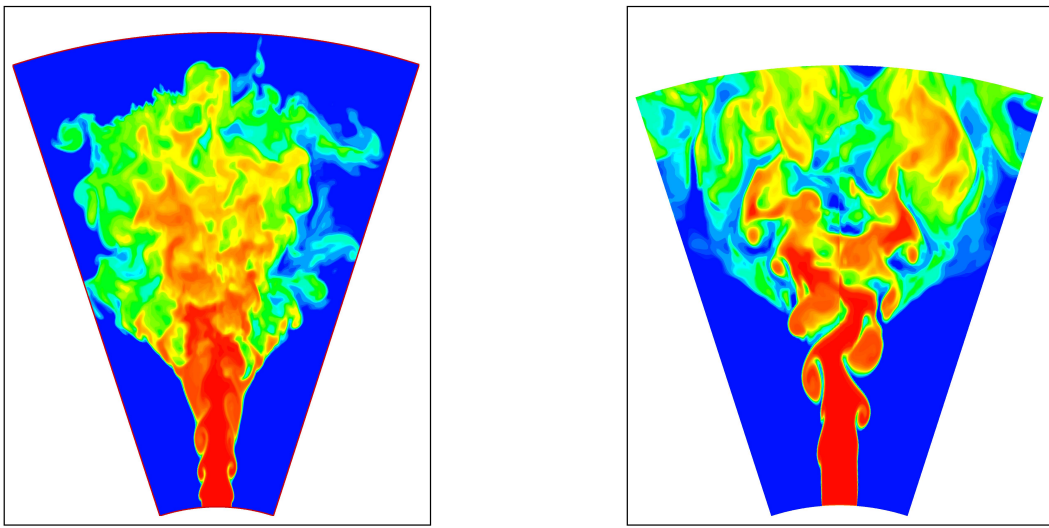


Figure 1.6.: Exemples de jets *bifurquant* obtenus numériquement. Une image similaire extraite de [Danaila and Boersma \(1998\)](#) a été utilisée comme illustration dans l'ouvrage de [Durbin and Pettersson Reif \(2000\)](#).



1. *Éléments spectraux et différences finies pour les jets ronds*



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

### Présentation générale

---

La simulation numérique directe (DNS) et des grandes échelles (LES) de l'écoulement qui se développe dans un moteur à combustion interne (ou, plus court, l'écoulement moteur) a constitué le sujet de mon séjour post-doctoral d'un an, effectué en 1999 à l'Institut Français du Pétrole (IFP).

Cette activité de recherche a bénéficié ensuite du soutien de l'IFP par l'intermédiaire de deux conventions de recherche dans la période 1999-2001, le co-encadrement d'un stage de DESS en 2002 (Ballestra, 2002) et le co-encadrement d'un stage post-doctoral en 2003 (El Ganaoui et al., 2005).

Je présente dans ce chapitre seulement les outils numériques et théoriques développés pour l'intégration des équations de Navier-Stokes compressibles. En lien avec cette activité, j'ai également développé un code Navier-Stokes incompressible qui sera présenté dans le chapitre 3.

Lors de mon séjour post-doctoral, j'ai développé et implémenté dans le code NTMIX de l'IFP une nouvelle méthodologie de type domaine fictif (frontière immergée) afin de simuler facilement des frontières en mouvement. La principale application de cette étude a été constituée par la simulation directe de plusieurs cycles moteur dans une configuration académique (moteur à chambre de combustion carrée). Ces résultats n'étant pas publiés, pour de raisons objectives, que sur la forme de rapports internes de l'IFP (Danaila and Baritaud, 1999; Danaila, 2001), je prends l'occasion d'en présenter quelques détails.

J'ai également utilisé la méthodologie de frontière immergée pour simuler un autre écoulement d'intérêt plus fondamental : l'évolution d'un dipôle de vorticit  et son interaction avec des obstacles (Danaila, 2004). Une autre structure tourbillonnaire sera ainsi rajout e dans la galerie des vortex pr sent es dans ce m moire.

La collaboration avec l'IFP m'a  galement permis d'aborder des sujets plus *industriels*. Je pr sente bri vement cette exp rience,   la fois de mod lisation des probl mes r els (El Ganaoui et al., 2005) et d' valuation de codes industriels (AVBP



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

et IFP-C3D).

**Mots clés :** différences finies, schémas compacts, équations de Navier-Stokes compressibles, frontière immergée, simulations 3D, écoulements moteur, dipôle de vortacité.

**Points forts :** méthodologie de frontière immergée implémentée dans le code industriel NTMIX, plusieurs conventions de recherche avec l'IFP, co-encadrement d'un stage post-doctoral et d'un stage de DESS.

**Publications :** articles : [A5], [A8], [A13],  
rapports : [R2], [R4], [R5]  
codes calcul : [Code3].

**Collaborations :** C. Habchi, T. Baritaud, C. Angelberger (Institut Français du Pétrole),  
O. El Ganaoui (Peugeot PSA),  
T. Poinso (CERFACS).

---



## 2.1. Méthode de frontière immergée et différences finies pour les équations de Navier-Stokes compressibles

La simulation de l'écoulement qui se développe dans un moteur à combustion interne pose de nombreux problèmes, liés à la fois à la modélisation des phénomènes complexes impliqués (écoulement diphasique, allumage, combustion, etc.) ainsi qu'aux techniques numériques employées pour la prise en compte de la géométrie compliquée du système. Si, de plus, les éléments en mouvement (piston soupapes) sont simulés, le système numérique est considérablement alourdi, ce qui réduit l'efficacité des codes industriels. Ces codes utilisent généralement des maillages non-structurés qui sont régénérés (localement ou globalement) à chaque changement de géométrie imposé par les frontières en mouvement (voir figure/animation 2.1). Les procédures de remaillage automatique sont très coûteuses et génèrent parfois des mailles trop étirées ou superposées.

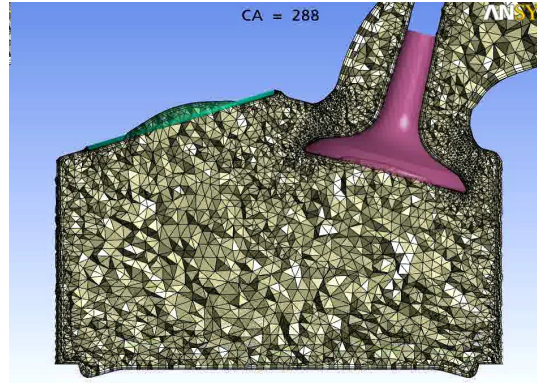


Figure 2.1.: (Animation) Exemple de configuration de calcul moteur industriel (communiqué par J. Hélie, Continental Automotive France).

D'autres techniques peuvent être utilisées, de type *Chimera* (voir Steger et al., 1983) ou *FAME* (flexible mesh embedding techniques) (voir Albone, 1992). Le principe est d'utiliser pour chaque composante en mouvement un maillage structuré qui bouge sur le maillage de la partie fixe. L'inconvénient de la méthode est la procédure d'interpolation d'un maillage à l'autre qui nécessite un calcul d'intersection de maillages.

Une alternative est offerte par les méthodes de type domaine fictif, parmi lesquelles se trouve la méthode de la frontière immergée. Introduite par C. S. Peskin dans sa thèse en 1972 pour simuler l'écoulement du sang dans la géométrie complexe du coeur (voir aussi ?), cette méthode redevient populaire et on assiste actuellement à une explosion de variantes de la méthode (pour un article de synthèse récent, voir Mittal and Iaccarino, 2005).



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

Comme son nom l'indique, le principe général de la méthode de la frontière immergée est d'utiliser un maillage cartésien fixe dans lequel chaque obstacle solide est immergé en gardant la trace de l'intersection de son contour avec le maillage. Les équations d'évolution seront résolues sur tout le maillage, avec bien entendu, une modification de leur formulation au voisinage et/ou à l'intérieur de l'obstacle. Comment modifier les équations d'évolution pour prendre en compte la présence de l'obstacle fait précisément l'objet des multiples variantes de la méthode.

J'ai utilisé une méthode qui consiste à calculer une force volumique ( $\mathbf{f}$ ) qui est introduite dans les équations de Navier-Stokes comme terme source de forçage. Le champ vectoriel ( $\mathbf{f}$ ) agit seulement à l'intérieur de l'obstacle – il est calculé à partir d'une vitesse  $\mathbf{V}_b$  imposée sur le contour du corps solide ( $\mathbf{V}_b = 0$  pour un obstacle fixe). Cette méthode (parfois appelée *body-force method*) a été utilisée sous différentes formes dans la littérature, en utilisant une forme intégrale (modèle du ressort) pour calculer  $\mathbf{f}$  de manière itérative (Saiki and Biringen, 1996), ou en adaptant une méthode de pénalisation modélisant les écoulements en milieu poreux (Angot et al., 1999).

J'ai adapté la variante proposée par Mohd-Yosuf (1997) au code NTMIX de l'IFP. C'était la première fois qu'une méthode de type *body-force* était utilisée dans un solveur Navier-Stokes compressible. La méthode étant très simple à implémenter dans n'importe quel code utilisant un schéma d'intégration en temps explicite, je présente brièvement dans la suite les principales idées de l'approche. Les équations de Navier-Stokes compressibles sont écrites en rajoutant un terme de forçage  $\mathbf{f}$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \cdot \mathbf{V} \\ \rho e \end{pmatrix} + \text{div} \begin{pmatrix} \rho \cdot \mathbf{V} \\ \rho \cdot \mathbf{V} \otimes \mathbf{V} + p \cdot \vec{I} \\ \rho e \cdot \mathbf{V} + p \cdot \mathbf{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{f} \\ \mathbf{f} \cdot \mathbf{V} \end{pmatrix} + \text{div} \begin{pmatrix} 0 \\ \vec{\tau} \\ \vec{\tau} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{q} \end{pmatrix}. \quad (2.1.1)$$

Le vecteur  $\mathbf{f}$  sera fonction de l'espace et du temps et va agir seulement dans les mailles traversées par le contour de l'obstacle solide. Il sera calculé à chaque pas de temps suivant un schéma dépendant de la méthode d'intégration. Avec une méthode de Runge-Kutta, l'intégration des équations (2.1.1) se fait suivant le schéma général :

$$\mathbf{Y}(t_n + \alpha \Delta t) = \mathbf{Y}(t_n) + \beta \Delta t [\mathbf{RHS}(t_n) + \mathbf{F}(t_n)], \quad \mathbf{Y} = \rho \mathbf{V}. \quad (2.1.2)$$

Remarquons dans (2.1.2) que la méthode est appliquée seulement aux équations de quantité de mouvement (les deux premières dans (2.1.1)), ce qui est cohérent physiquement. Le vecteur  $\mathbf{RHS}$  contient les termes non-linéaires, de pression et les termes visqueux. Si on veut maintenant imposer  $\mathbf{Y}_b = \rho \mathbf{V}_b$  à l'instant de temps  $t_n + \alpha \Delta t$ , le terme de forçage sera calculé par :

$$\mathbf{F}(t_n) = \frac{\mathbf{Y}_b(t_n + \alpha \Delta t) - \mathbf{Y}(t_n)}{\beta \Delta t} - \mathbf{RHS}(t_n). \quad (2.1.3)$$

Le travail de cette force,  $\mathbf{f} \cdot \mathbf{V}_b$  sera ensuite rajouté comme terme source de l'équation de l'énergie (la troisième dans (2.1.1)).



## 2.1. Frontière immergée dans un code Navier-Stokes compressible

L'algorithme complet est résumé dans le tableau 2.1.

pas RK	temps	Algorithme
0	$t_n$	initialisation
1	$t_n + \frac{1}{4}\Delta t$	$Y' = Y^n + \frac{1}{4}\Delta t \mathbf{RHS}_n$ $\Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{1}{4}\Delta t) = -\frac{1}{4}\Delta t \mathbf{RHS}_n + [Y_b(t_n + \frac{1}{4}\Delta t) - Y^n]$ $Y' = Y' + \Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{1}{4}\Delta t)$
2	$t_n + \frac{8}{15}\Delta t$	$Y'' = Y^n + \frac{8}{15}\Delta t \mathbf{RHS}_n$ $\Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{8}{15}\Delta t) = -\frac{8}{15}\Delta t \mathbf{RHS}_n + [Y_b(t_n + \frac{8}{15}\Delta t) - Y^n]$ $Y'' = Y'' + \Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{8}{15}\Delta t)$
3	$t_n + \frac{2}{3}\Delta t$	$Y^{iv} = Y' + \frac{5}{12}\Delta t \mathbf{RHS}''$ $\Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{2}{3}\Delta t) = -\frac{5}{12}\Delta t \mathbf{RHS}'' + [Y_b(t_n + \frac{2}{3}\Delta t) - Y']$ $Y^{iv} = Y^{iv} + \Delta t \mathbf{F}(t_n + \frac{2}{3}\Delta t)$
4	$t_n + \Delta t$	$Y^{n+1} = Y' + \frac{3}{4}\Delta t \mathbf{RHS}^{iv}$ $\Delta t \mathbf{F}(t_n + \Delta t) = -\frac{3}{4}\Delta t \mathbf{RHS}^{iv} + [Y_b(t_n + \Delta t) - Y']$ $Y^{n+1} = Y^{n+1} + \Delta t \mathbf{F}(t_n + \Delta t)$

Tableau 2.1.: Algorithme pour l'implémentation d'une méthode de type frontière immergée dans un schéma d'intégration de Runge–Kutta d'ordre 4. Le stockage des variables est optimisé pour avancer de  $t_n$  à  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ . Le second membre est évalué en utilisant les variables conservatives,  $RHS^* = RHS(Y^*)$ .

Faisons quelques remarques sur cette méthode :

- Elle est très simple à implémenter, sans avoir à toucher au schéma numérique original. Les performances du code original (vectorisation, parallélisme) sont gardées et le coût de calcul supplémentaire est négligeable.
- La dérivation numérique du terme de forçage dépend de la méthode d'intégration du code original, ce qui restreint la généralité de la méthode.
- La force est discontinue à l'interface fluide-solide, ce qui peut introduire des oscillations dans la solution si la diffusion numérique n'est pas importante (voir aussi Saiki and Biringen, 1996). C'est le cas des schémas de différences finies compacts à l'ordre six utilisés dans NTMIX (j'aurai l'occasion de décrire ces schémas dans le chapitre 5). Pour éliminer ces oscillations, j'ai adopté la solution (très économique) de filtrer le champ de vitesse tous les dix pas de temps par un filtre compact passe-bas (Lele, 1992). Le schéma reste ainsi stable, sans que le champ de vitesse en soit affecté (seulement 2% de l'énergie est éliminée par filtrage).
- Les équations sont résolues partout dans le domaine de calcul, donc on aura un écoulement à l'intérieur du corps solide. Bien entendu, cet écoulement n'est pas physique, mais il peut, en certains cas, déstabiliser le schéma numérique.



### 2.1.1. Simulation d'un écoulement moteur académique

La méthode de frontière immergée a été appliquée à l'étude de l'écoulement qui se développe dans une machine de compression de forme... carrée. Loin d'être un prototype moteur, ce dispositif expérimental a été réalisé à l'Institut de mécanique des fluides de Toulouse ([Maurel et al., 2001](#)). Il permet d'étudier dans un cadre simplifié le gros tourbillon (*tumbling vortex*) qui se forme dans un cylindre moteur pendant l'injection et qui se fragmente pendant la compression. La figure 2.2 montre le schéma de la configuration 2D simulée, avec un piston qui se déplace suivant une lois sinusoïdale et avec une condition à la limite en haut modifiée pour permettre à la fois l'admission de fluide quand le piston descend et l'évacuation de fluide quand le piston monte. Pour ce faire, la formulation des conditions aux limites originales du code ([Poinsot and Lele, 1992](#)) a été modifiée. L'animation du champ de vitesse pour ce cas est montrée sur la figure 2.3.

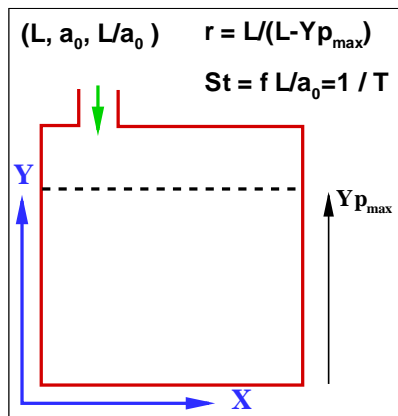


Figure 2.2.: Configuration de la simulation 2D de la machine de compression carrée.

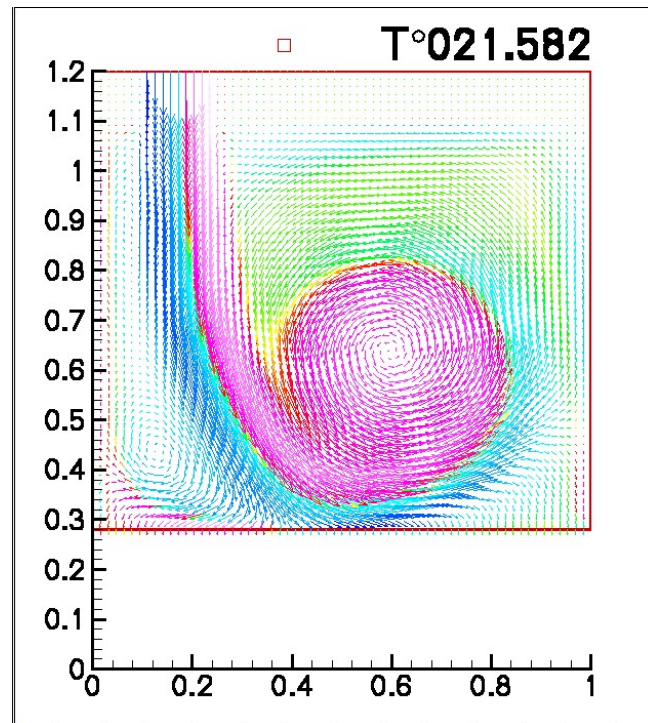


Figure 2.3.: (Animation) Évolution du champ de vecteurs vitesse pendant un cycle d'admission-compression.

La méthode a été facilement étendue pour simuler la configuration similaire en 3D. L'évolution du vortex observée en 3D est différente de celle 2D et se rapproche des observations expérimentales. Plus de résultats sont présentés dans le rapport [Danaila \(2001\)](#).



### 2.1.2. Interaction d'un couple de tourbillons avec un obstacle

Une autre application, d'intérêt fondamental cette fois, a été la simulation de l'interaction entre un couple de tourbillons contra-rotatifs (dipôle de vortacité) avec des obstacles de dimension finie (Danaila, 2004). Ces structures sont rencontrées dans plusieurs types de configurations réelles : écoulements côtiers, moteurs à charge stratifiée, tourbillons derrière un avion, etc. Le modèle analytique de Lamb-Chaplygin (Lamb, 1932) permet de décrire analytiquement le dipôle de vortacité. Comme il s'agit d'une solution exacte des équations d'Euler en deux dimensions qui constitue un bon cas test pour un code numérique (le couple de tourbillons doit se propager par auto-induction à une vitesse constante) je rappelle brièvement les formules la décrivant.

---

La vortacité  $\omega$  est concentrée dans un cercle de rayon  $a$ . La fonction de courant décrivant un couple de tourbillons contra-rotatifs qui se déplace le long de l'axe  $y$  s'écrit en coordonnées polaires  $(r, \theta)$  :

$$\psi_{in} = C J_1(kr) \cos \theta, \quad r \leq a,$$

où  $J_1$  est la fonction de Bessel d'ordre un et  $C$  un paramètre donnant l'intensité du dipôle. L'écoulement extérieur est irrotationnel, avec la vitesse à l'infini égale à la vitesse ( $V_c$ ) de translation du dipôle :

$$\psi_{out} = -V_c \left( r - \frac{a^2}{r} \right) \cos \theta, \quad r > a.$$

La continuité à la frontière  $r = a$  impose  $J_1(ka) = 0$ , avec une première racine correspondant à  $ka \approx 3.83$ . La vitesse de translation est obtenue en imposant la continuité de la vitesse tangentielle  $v_\theta = -\partial\psi/\partial r$  :

$$V_c = -\frac{C}{2} k J_1'(ka) \approx -0.771 \frac{C}{a}$$

Remarquons que la continuité de la vitesse radiale est également vérifiée à  $r = a$  ( $v_r = 1/r \partial\psi/\partial\theta = 0$ ). La vortacité est finalement donnée par  $\omega = -\Delta\psi$  :

$$\omega_{in} = k^2 \psi_{in}, \quad \omega_{out} = 0.$$

Pour la simulation numérique il suffit d'imposer le champ de vitesses :

$$v_r = 1/r \partial\psi/\partial\theta, \quad v_\theta = -\partial\psi/\partial r.$$


---



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

Les animations 2.4 montrent deux cas de calcul, avec des interactions de tourbillons complexes à cause de l'enroulement de la couche limite qui se forme à la frontière de l'obstacle (représenté en gris). Cette contribution (Danaila, 2004) a permis de compléter le tableau décrivant ce type d'interactions dans la littérature (pour l'interaction avec des obstacles infinis, voir Orlandi and Verzicco, 1993).

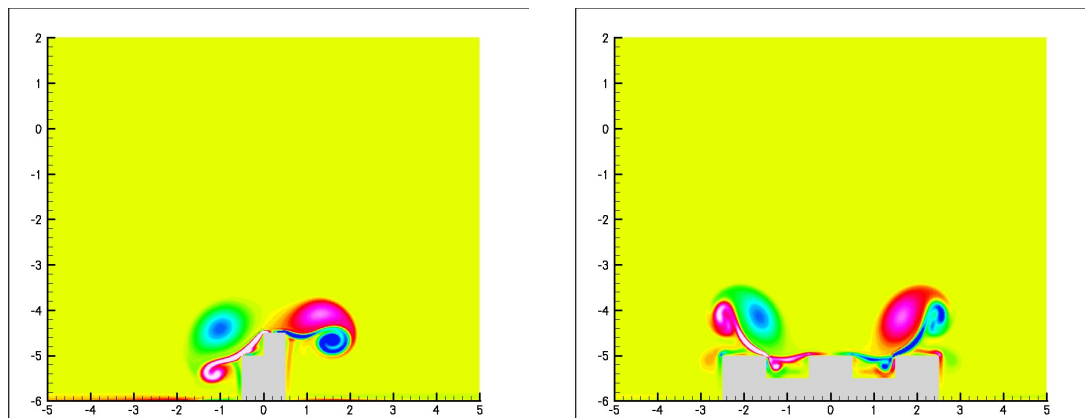


Figure 2.4.: (Animations) Interaction entre un couple de tourbillons avec des obstacles modélisés par une méthode de frontière immergée. Évolution du champ de vorticit .

## 2.2.   valuation de codes industriels (AVBP) et mod  lisation

Dans le cadre de mes conventions de recherche avec l'Institut Fran ais du P trole, j'ai eu  galement l'occasion d'aborder des sujets tr s appliqu s. Il s'agit de l' valuation du comportement des codes industriels sur des cas test acad miques et de la mod lisation des conditions d'injection dans un moteur cette fois r el. J'ai la conviction que pour un d veloppeur de codes acad miques,  tre au contact des vrais besoins de la simulation en industrie et pouvoir  valuer les capacit s des codes qu'elle utilise constitue une exp rience enrichissante.

Apr s une courte description des principales approches utilis es actuellement dans la simulation des  coulements fluides (DNS, LES, RANS), je pr sente en bref cette activit  qui a fait l'objet d'un rapport (Danaila and Benteboula, 2004) et d'une publication El Ganaoui et al. (2005).



### Concepts de DNS, LES et RANS.

Les écoulements industriels étant caractérisés par un large spectre d'échelles spatiales (écoulement turbulent), une approche numérique idéale serait la simulation de toutes ces échelles sans aucune modélisation. Ce type d'approche, appelée couramment *DNS* (*Direct Numerical Simulation*), n'est pas utilisable pour la simulation des écoulements industriels (nombre de Reynolds  $Re$  très grand), car les maillages très fins requis (nombre de mailles  $\sim Re^{9/4}$ ) ne sont pas abordables avec les ordinateurs actuels.

Les codes industriels s'affranchissent de cette difficulté en utilisant une approche statistique de l'écoulement turbulent - les grandeurs caractérisant l'écoulement sont décomposées en une valeur moyenne (calculée directement) et une valeur fluctuante (modélisée dans les équations). Ces approches, appelées *RANS* (*Reynolds Averaged Navier Stokes*), offrent une image *moyennée* de l'écoulement. Pour un écoulement moteur, par exemple, le résultat est la moyenne de phase d'un grand nombre de cycles de fonctionnement consécutifs. Les simulations RANS sont les plus répandues en industrie, car peuvent être réalisées, pour une configuration complexe, en quelques heures de calcul.

Une approche intermédiaire, qui commence à être utilisée de plus en plus pour le calcul des écoulements industriels, est la *LES*, ou *Large Eddy Simulation* - *Simulation des grandes échelles*. Le principe de la méthode est de calculer directement la plupart des échelles de l'écoulement (comme dans la DNS) et de modéliser seulement la partie sous-maille (de taille inférieure à la taille du maillage). L'avantage de cette méthode qui s'applique pour des nombres de Reynolds relativement grands est de fournir une description complète de l'évolution instationnaire de l'écoulement. En échange, extraire des statistiques à partir d'un calcul LES peut s'avérer trop coûteux.

D'un point de vue pratique, l'approche DNS est exclusivement utilisée pour des études académiques, tandis que les méthodes RANS et LES sont des approches complémentaires pour l'étude des écoulements industriels.

---

Dans le rapport (Danaila and Benteboula, 2004) j'évalue le comportement du code AVBP pour la simulation d'un cas académique. Le code AVBP est un exemple récent de code de recherche (Schönfeld and Rudgyardt, 1999) qui est devenu un code industriel en moins de 10 ans. Initié au CERFACS<sup>1</sup>, il est actuellement développé par une grosse équipe multi-sites, constitué de 60 chercheurs des universités (IMFT Toulouse, École centrale) et de l'industrie (CERFACS, IFP, SAFRAN, etc).

Le code étant parallèle en MPI (il tourne au CERFACS sur une machine IBM Blue Gene à 4096 processeurs), je l'ai installé sur le cluster Hydre du laboratoire en utilisant pour les calculs seulement 4 processeurs.

---

<sup>1</sup>Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique, Toulouse.



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

Je me suis intéressé aux aspects purement numériques dans l'utilisation du code AVBP. Les équations de Navier-Stokes compressibles sont intégrées par un schéma explicite, soit de Lax-Wendroff, soit de Runge-Kutta. La discrétisation spatiale est de type volumes finis *cell-vertex* avec les inconnues stockées aux noeuds du maillage – une approche de résidus pondérés de type upwind est utilisée pour l'évaluation des intégrales de surface. Un schéma de type éléments finis de Taylor-Galerkin du troisième ordre en temps et en espace est également disponible dans le code. Les conditions aux limites utilisent un traitement par caractéristiques des équations de Navier-Stokes linéarisées aux frontières (Poinsot and Lele, 1992).

Le cas test considéré est l'injection de fluide dans un milieu au repos représenté par un domaine simple, cylindrique. L'écoulement est dominé par le tourbillon toroïdal qui se forme en tête – il sera décrit plus en détail dans le chapitre 3. La figure 2.6 montre la propagation du tourbillon dans le domaine de calcul. Les résultats obtenus

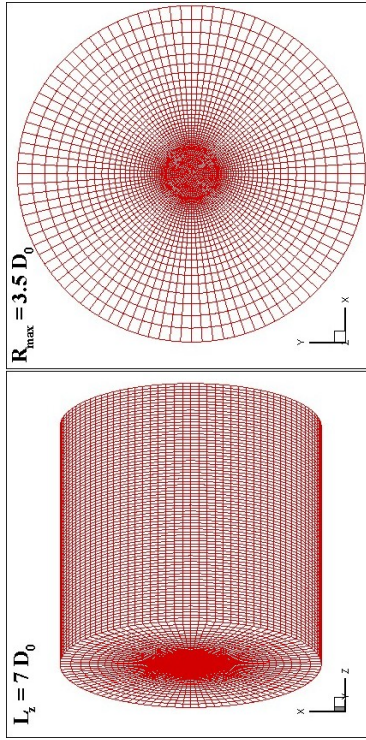


Figure 2.5.: Simulation avec le code AVBP. Domaines de calcul cylindrique 3D.

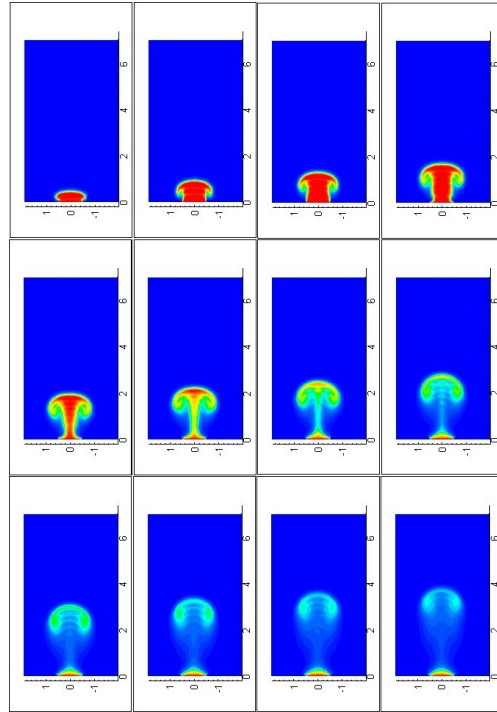


Figure 2.6.: Simulation 3D avec le code AVBP. Injection de  $CH_4$  dans un milieu (air) initialement au repos. Champ du scalaire (coupe 2D).

sur un maillage structuré 3D (figure 2.5) et avec un schéma de Lax-Wendroff sont comparés aux résultats donnés par mon code JETLES (chapitre 3) pour une faible vitesse d'injection (écoulement incompressible). Malgré la présence inhérente des



## 2.2. Évaluation de codes industriels (AVBP) et modélisation

ondes de pression introduites par la formulation compressible (le nombre de Mach est dans ce cas  $M = 0.4$ ), AVBP réussit à bien prédire la trajectoire du tourbillon pour ce faible nombre de Reynolds. Le temps de calcul est en échange très important à cause des restrictions sur le pas de temps imposés par le schéma explicite.

Afin de réduire le temps de calcul, j'ai mis en place un calcul *axisymétrique*, ce qui n'est pas très courant dans l'utilisation d'AVBP. Les résultats sont similaires au calcul 3D, avec une réduction substantielle du temps de calcul d'un facteur 70. En diminuant le nombre de Mach de l'écoulement ( $M < 0.04$ ) les ondes de pression ne sont plus visibles et les résultats AVBP sont identiques aux résultats obtenus avec le code incompressible JETLES pour le même nombre de Reynolds.

Je dois également mentionner que cette configuration a servi pendant le développement de la version à faible nombre de Mach (*low-Mach*) (section 3.2) du code JETLES pour valider les calculs préliminaires.

L'effort de modélisation (stage post-doctoral de O. El Ganaoui que j'ai co-encadré) a porté sur la mise en place d'un calcul avec le code IFP-C3D pour un cas d'injection réelle, étudié expérimentalement sur les bancs moteur de l'IFP. Il s'agit d'un code RANS qui est développé à l'IFP pour l'étude des écoulements moteur. Il utilise des volumes finis hexaédriques, non-structurés, et différents schémas d'intégration avec pas de temps divisé (*time splitting*) de type SIMPLE. Le modèle de turbulence est de type  $k-\varepsilon$  et les parties en mouvement sont traitées par une méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).

Les résultats numériques ont été progressivement raffinés en adoptant, d'une part, une modélisation théorique des conditions à l'entrée du domaine de calcul (conditions supersoniques) et, d'autre part, en effectuant une étude fine de sensibilité aux paramètres numériques (dissipation du schéma, influence du maillage, effet du modèle de turbulence). L'effort de mise en place d'un calcul axisymétrique (figure 2.7) a été payant par rapport au calcul 2D habituel, car il a permis d'obtenir un meilleur accord avec l'expérience (figure 2.8).

Je dois souligner le fait qu'il s'agit d'un cas de calcul très compliqué qui met à rude épreuve les codes industriels et qui est difficilement abordable avec les codes académiques. Les résultats obtenus ont fait l'objet d'un article de revue (El Ganaoui et al., 2005).



## 2. Simulation numérique DNS et LES des écoulements moteur

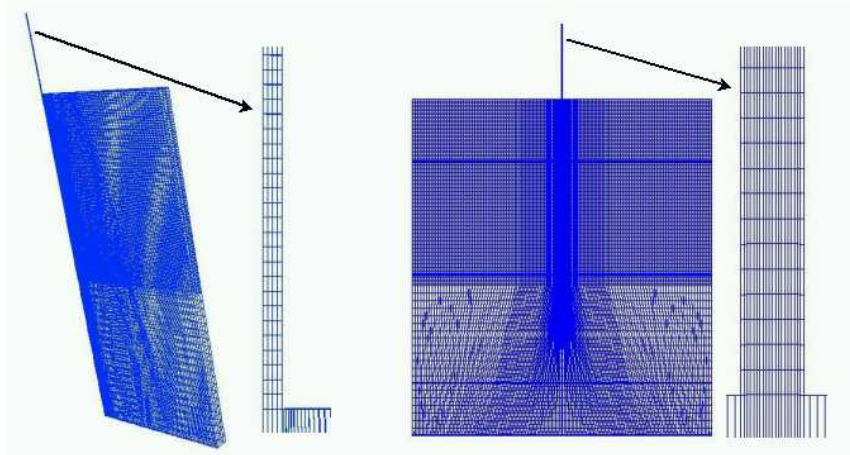


Figure 2.7.: Simulation avec le code IFP-C3D (El Ganaoui et al., 2005). Domaine de calcul axisymétrique et domaine 2D.

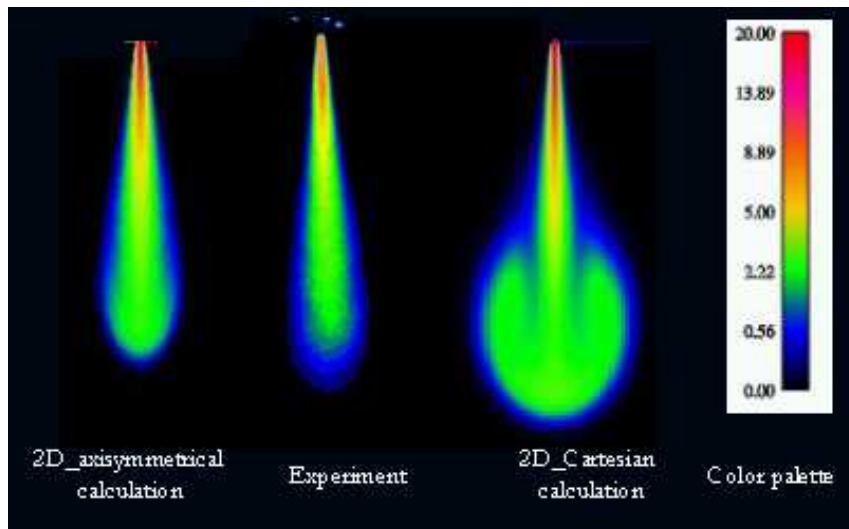


Figure 2.8.: Simulation avec le code IFP-C3D (El Ganaoui et al., 2005). Évolution du jet de carburant. Comparaison (dans l'ordre) entre la simulation axisymétrique, l'expérience et la simulation 2D.



# 3. Méthodes de différences finies pour la simulation d'écoulements fluides en coordonnées cylindriques : code JETLES

## Présentation générale

---

Il s'agit de ma principale activité de recherche dans la simulation des écoulements fluides *classiques*. Après la thèse, j'ai pris l'initiative de développer mon propre code de calcul pour simuler des écoulements de type jet rond. Mon choix s'est porté sur une méthode de résolution des équations Navier-Stokes incompressibles, formulées en coordonnées cylindriques. Le nouveau code JETLES (simulation du *JET* par approches *LES*, simulations des grandes échelles) permet la simulation 3D ou axi-symétrique des écoulements qui se développent en espace et en temps dans des domaines cylindriques (jet rond, tourbillon toroïdal, etc.). Le code intègre des idées du modèle *temporel* du code homonyme du Professeur P. Orlandi de l'Université de Rome, avec lequel j'ai eu le plaisir de collaborer pendant l'écriture initiale du code. Une description de la méthode numérique pour la simulation temporelle (conditions de périodicité suivant l'axe de l'écoulement) est disponible maintenant dans l'ouvrage [Orlandi \(1999\)](#).

Pour le développement du code j'ai étudié des schémas de différences finies et des méthodes d'intégration adaptées à la formulation des équations de Navier-Stokes en coordonnées cylindriques. Des difficultés mathématiques particulières liées à cette formulation (traitement de la singularité introduite par l'axe, conditions aux limites, résolution rapide de l'équation de Poisson) ont dû être surmontées.

D'un point de vue informatique, le code a été optimisé afin d'être performant sur des stations de travail. En utilisant un seul processeur, il permet des résolutions inabordables par les codes industriels ou commerciaux que j'ai utilisés. Écrit en Fortran, avec une architecture simple, il est facilement compris par les étudiants et les collaborateurs qui l'utilisent. JETLES est à la base des sujets de recherche développés dans un stage de DESS (M. Ballestra, 2002) et un stage post-doctoral (O. El Ganaoui, 2003–2004) à l'Institut Français du Pétrole. J'ai également encadré



### 3. Différences finies en coordonnées cylindriques : code JETLES

(à 95%) une thèse de l'Université Marne la Vallée (S. Benteboula), soutenue en 2006.

Les applications d'intérêt industriel (l'injection de carburant dans les moteurs Diesel) abordées avec JETLES ont fait l'objet de deux conventions de recherche avec l'IFP et, plus récemment, d'un contrat avec Continental Automotive France.

Ce chapitre commence par décrire la méthode numérique utilisée dans JETLES pour la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles. L'extension du code pour traiter des écoulements à faible nombre de Mach, ou *low Mach* (thèse de S. Benteboula) est ensuite présentée. Les résultats numériques sur l'évolution d'un tourbillon toroïdal (*vortex ring*) sont finalement montrés.

Le code JETLES est en pleine évolution (cf. manuel [R1]) et ouvre de nouvelles perspectives de recherche (voir le chapitre suivant).

**Mots clés :** différences finies, maillage décalé, équations de Navier-Stokes incompressibles, approximation à faible nombre de Mach (*low Mach*), simulations 3D ou axisymétrique, tourbillon toroïdal (*vortex ring*)

**Points forts :** Une convention de recherche avec Continental Automotive France et deux conventions de recherche avec l'IFP, encadrement d'une thèse, d'un stage de DESS et d'un stage post-doctoral. Les méthodes numériques développées sont également présentées, dans un cadre simplifié, dans les ouvrages [O1] et [O2].

**Publications :**

articles	: [A1, A2, A4, A5, A12],
rapports	: [R2, R3],
manuel	: [R1],
codes calcul	: [Code3].

**Collaborations :**

J. Hélie (Continental Automotive France),
C. Habchi, C. Angelberger (Institut Français du Pétrole),
P. Orlandi (Université de Rome),
B. J. Boersma (Université de Delft, Pays Bas),
L. Djenidi, R. A. Antonia (Université de Newcastle, Australie).

---



## 3.1. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles

### 3.1.1. Système d'équations

Les équations de Navier-Stokes 3D, incompressibles, écrites en coordonnées cylindriques  $(r, \theta, z)$  sont résolues par une méthode de différences finies, présentée dans [Orlandi \(1999\)](#). La singularité introduite par l'axe ( $r = 0$ ) est contournée en considérant comme variables primitives ( $q_\theta = v_\theta, q_r = v_r \cdot r, q_z = v_z, p$ ) et en utilisant un maillage décalé.

---

En coordonnées cylindriques, les équations à résoudre s'écrivent :

- l'équation de continuité :

$$\frac{1}{r} \left( \frac{\partial q_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial q_r}{\partial r} + r \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (3.1.1)$$

- les équations de quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{Dq_\theta}{Dt} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial r} r^3 \frac{\partial q_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 q_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 q_\theta}{\partial z^2} + \frac{2}{r^3} \frac{\partial q_r}{\partial \theta} \right] \\ \frac{Dq_r}{Dt} &= -r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial q_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 q_r}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 q_r}{\partial z^2} - \frac{2}{r} \frac{\partial q_\theta}{\partial \theta} \right] \\ \frac{Dq_z}{Dt} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial q_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 q_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 q_z}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

où les dérivées totales ont les expressions :

$$\begin{aligned} \frac{Dq_\theta}{Dt} &= \frac{\partial q_\theta}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r q_r q_\theta) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (q_\theta q_\theta) + \frac{\partial}{\partial z} (q_\theta q_z) \\ \frac{Dq_r}{Dt} &= \frac{\partial q_r}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{q_r q_r}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{q_r q_\theta}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} (q_r q_z) - q_\theta q_\theta \\ \frac{Dq_z}{Dt} &= \frac{\partial q_z}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (q_r q_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (q_\theta q_z) + \frac{\partial}{\partial z} (q_z q_z) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Le paramètre sans dimension est le nombre de Reynolds,  $Re = VL/\nu$ , défini par rapport à la viscosité cinématique ( $\nu$ ) du fluide et des échelles caractéristiques de vitesse ( $V$ ) et de longueur ( $L$ ).

---



### 3.1.2. Discrétisation en temps : méthode à pas de temps fractionné

La résolution des équations de quantité de mouvement utilise une méthode de Runge–Kutta précise à l'ordre trois, pour les termes convectifs, et une méthode de Crank–Nicolson pour les termes diffusifs. La correction du champ de vitesse pour satisfaire l'équation de continuité est faite par l'intermédiaire d'une équation de Poisson.

Plus en détail, les équations (3.1.1) et (3.1.2) sont résolues par une version de la méthode de projection, appelée “méthode à pas de temps fractionné” (*fractional step method*). Cette formulation proposée par Rai and Moin (1991) a été modifiée par Verzicco and Orlandi (1996). L'intégration en temps est réalisée par un schéma de Runge–Kutta à trois pas ; pour chaque pas intermédiaire de Runge–Kutta ( $l$ ) :

(A) on calcule, dans une première étape, un champ de vitesse non-solénoïdal ( $\hat{q}^l$ ), par la résolution des équations de quantité de mouvement (3.1.2). Les termes convectifs et le gradient de pression sont traités en explicite, tandis que pour les termes visqueux on utilise un traitement semi-implicite (schéma de Crank–Nicolson). Les équations discrétisées en temps sont écrites sous la forme compacte :

$$\frac{\hat{q}_c^l - q_c^l}{\Delta t} = \left[ \gamma_l \mathcal{H}_c^l + \rho_l \mathcal{H}_c^{l-1} - \alpha_l \mathcal{G}_c p^l + \frac{\alpha_l}{2} \mathcal{A}_c (\hat{q}_c^l + q_c^l) \right], \quad \text{pour } c = \theta, r, z, \quad (3.1.4)$$

avec  $\mathcal{H}$  les termes explicites (incluant les termes convectifs et aussi les termes visqueux croisés) et  $\mathcal{A}$  les opérateurs visqueux restants.

Les coefficients du schéma Runge–Kutta sont dérivés analytiquement pour obtenir une précision à l'ordre deux en temps. Rai and Moin (1991) ont obtenu les valeurs des coefficients ( $\alpha_l, \gamma_l, \rho_l$ ) pour un schéma à trois pas. Dans Danaila (1999–2008), je dérive une famille de schémas de type Runge–Kutta pour obtenir l'ordre deux en deux pas seulement. Les résultats sont les mêmes, avec une économie importante de temps de calcul. Il est important d'imposer dans le schéma  $\rho_1 = 0$  pour pouvoir démarrer la procédure Runge–Kutta sans stocker l'état précédent.

Les équations discrétisées (3.1.4) sont résolues par une factorisation précise à l'ordre deux en temps (méthode ADI) qui implique seulement la résolution de systèmes linéaires à matrice tridiagonale. La factorisation LU des matrices est stockée avant la boucle en temps, ce qui se traduit par un gain important de temps de calcul.

(B) on corrige le champ ( $\hat{q}^l$ ), dans une deuxième étape, pour satisfaire l'équation de continuité (3.1.1).

L'équation de correction :

$$q_c^{l+1} - \hat{q}_c^l = -\alpha_l \Delta t \mathcal{G}_c \Phi^{l+1}, \quad c = \theta, r, z, \quad (3.1.5)$$



### 3.1. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes incompressibles

conduit à une équation de Poisson si on tient compte que le champ  $\vec{q}^{l+1}$  est de divergence nulle :

$$\mathcal{L}\Phi^{l+1} = \frac{1}{\alpha_l \Delta t} \mathcal{D}\vec{q}^l \quad (3.1.6)$$

Les opérateurs gradient, divergence et laplacien sont définis de manière classique, par :

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, r \frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \mathcal{D} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z}, \\ \mathcal{L} = \mathcal{D}\mathcal{G} &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \end{aligned}$$

Il est important que les conditions aux limites nécessaires dans l'équation (3.1.6) soient consistantes avec les conditions imposées sur le champ non-solénoïdal, à travers l'équation de correction (3.1.5).

L'équation de Poisson (3.1.6) est résolue en utilisant d'abord une transformée de Fourier rapide (**FFT**) dans la direction périodique  $\theta$ . Le système résultant (directions  $r$  et  $z$ ) est résolu par une méthode de réduction cyclique en utilisant la procédure **BLKTTRI** de la bibliothèque Fortran **FISHPACK**. L'implémentation de cette méthode dans le code a fait l'objet du stage de DESS Paris 6 de M. Ballestra (Ballestra, 2002).

(C) Une fois le champ scalaire  $\Phi$  calculé, nous revenons maintenant dans l'équation (3.1.5) pour calculer le champ solénoïdal  $q_c^{l+1}$ , avec  $c = \theta, r, z$ . Enfin, le gradient de pression est réactualisé par l'équation suivante :

$$\mathcal{G}_c p^{l+1} = \mathcal{G}_c p^l + \mathcal{G}_c \Phi^{l+1} - \frac{\alpha_l \Delta t}{2} \mathcal{A}_c (\mathcal{G}_c \Phi^{l+1}). \quad (3.1.7)$$

À partir de ce point, les champs de vitesse et de pression sont réactualisés pour le pas suivant du schéma de Runge-Kutta.

#### 3.1.3. Discrétisation spatiale : différences finies sur maillage décalé

Le domaine de calcul est cylindrique (figure 3.1), défini par sa longueur ( $L_z$ ) et le rayon maximum  $R_{max}$ . Les points de maillage sont équidistants dans les directions azimutale ( $\theta$ ) et axiale ( $z$ ); l'uniformité en  $\theta$  est absolument nécessaire pour l'utilisation des développements trigonométriques (FFT) dans l'équation de correction. Dans la direction radiale  $r$  le maillage est resserré en utilisant une loi de raffinement en tangente hyperbolique (pour plus de détails, voir Ballestra, 2002).



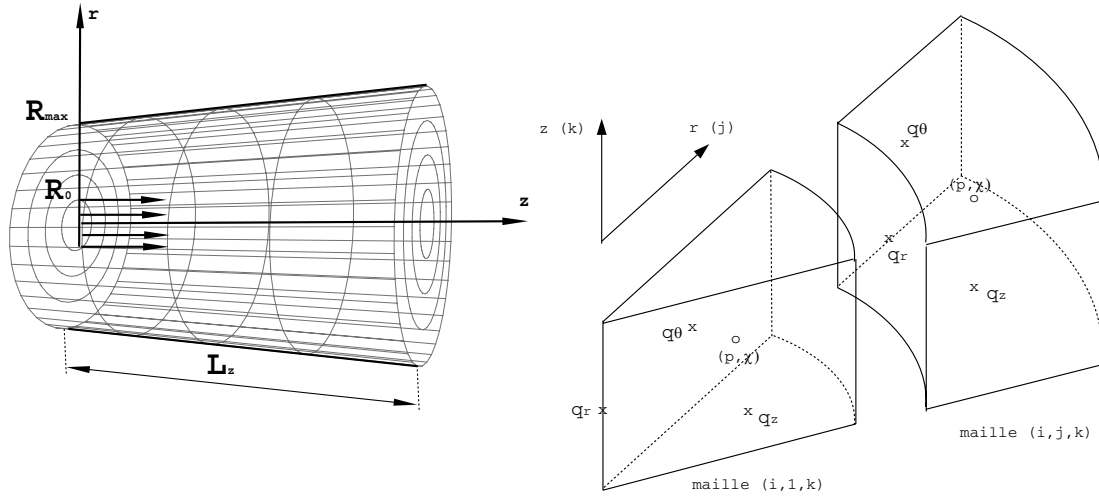


Figure 3.1.: Domaine de calcul cylindrique et maillage décalé.

Les dérivées spatiales sont approchées par un schéma de différences finies centrées en utilisant une représentation décalée des variables primitives : les vitesses sont stockées sur les faces de la cellule et la pression au milieu (voir figure 3.1). Pour le maillage à pas variable, nous avons étudié (Ballestra, 2002) plusieurs schémas d'approximation pour les dérivées, avec parfois des résultats surprenants : la meilleure approximation est donnée par une évaluation discrète des métriques plutôt que par une évaluation analytique.

Les conditions aux limites sont adaptées à chaque cas de calcul considéré. Elles sont discutées dans Danaila (1999–2008) et Benteboula (2006) et présentées plus en détail dans la section 3.3 concernant les applications.

## 3.2. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach

Le spectre des applications abordées par un code Navier-Stokes incompressible, restreint à des écoulements à masse volumique constante, peut être sensiblement élargi en adoptant l'approximation des équations dans le cas d'un écoulement à faible nombre de Mach. Ce paramètre sans dimension est défini par le rapport  $M = V/a$ , où  $V$  est la vitesse caractéristique de l'écoulement et  $a$  la célérité du son. L'approximation à faible nombre de Mach (*low-Mach* en anglais) permet de garder des équations similaires à celles de Navier-Stokes incompressibles, en rajoutant seulement une équation d'évolution pour la masse volumique. D'un point de vue pratique, l'avantage de cette formulation est indéniable, car elle permet de garder totalement



### 3.2. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach

la structure d'un code incompressible – en particulier, si une méthode de projection est utilisée (comme décrit dans la section précédente), le solveur de l'équation de correction de Poisson ne change pas.

Un autre avantage de cette approche est de permettre la simulation des écoulements à masse volumique variable pour de faibles vitesses caractéristiques. Comme nous l'avons déjà constaté dans la section 2.2 du présent mémoire, l'utilisation des codes Navier-Stokes compressibles pour ces cas pose le problème de la résolution des ondes acoustiques (de pression), ce qui est très pénalisant en termes de temps de calcul (en théorie, le pas de temps devient infiniment petit quand  $M \rightarrow 0$ ). L'approche *low-Mach* permet de s'affranchir de cette difficulté, mais elle reste pertinente seulement pour des écoulements dont la variation de la masse volumique ( $\rho$ ) est due uniquement aux gradients de température ( $T$ ). Heureusement, ce type d'écoulements est présent dans de nombreux systèmes physiques, tels que la circulation océanique, la convection naturelle, et dans les processus industriels impliquant des phénomènes de combustion ou des réactions chimiques exothermiques.

D'un point de vue mathématique, la théorie du faible nombre de Mach tente à prouver, sous certaines hypothèses, la convergence des équations Navier-Stokes compressibles vers les équations incompressibles quand  $M \rightarrow 0$ . L'état de l'art de ces théories est présenté dans le numéro spécial M2AN (*Special issue on low Mach number flows*, Vol. 39, 2005). D'un point de vue numérique, plusieurs formulations sont utilisées dans la littérature (voir, par exemple, Knio et al., 2000; Majda and Sethian, 1985; Cook and Riley, 1996), en fonction du problème traité et des caractéristiques du schéma numérique employé.

La formulation retenue et les détails de l'implémentation en coordonnées cylindriques sont décrits dans le mémoire de thèse de Benteboula (2006). Je rappelle dans cette section seulement les principales idées du formalisme mathématique et de l'algorithme numérique développé. Quelques résultats sur le tourbillon toroïdal à masse volumique variable seront présentés dans la section 3.3 de ce chapitre.

#### 3.2.1. Système d'équations

Toute formulation *low-Mach* part des équations de Navier-Stokes compressibles et utilise un développement des variables en série de puissances d'un paramètre dépendant du nombre de Mach ( $M$ ). Nous adoptons ici la formulation à une seule échelle de pression qui permet d'éliminer les ondes acoustiques de l'écoulement. Elle consiste à prendre comme petit paramètre  $\epsilon = \gamma M^2$  et développer en série les va-



### 3. Différences finies en coordonnées cylindriques : code JETLES

riables primitives (masse volumique  $\rho$ , vitesse  $\mathbf{v}$ , pression  $p$  et énergie totale  $e$ ) :

$$\rho = \rho_0 + \epsilon \rho_1 + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.2.1)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \epsilon \mathbf{v}_1 + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.2.2)$$

$$T = T_0 + \epsilon T_1 + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.2.3)$$

$$p = p_0 + \epsilon p_1 + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (3.2.4)$$

$$\rho e = \frac{p_0}{\gamma - 1} + \epsilon \frac{p_1}{\gamma - 1} + \epsilon \rho_0 \frac{\mathbf{v}_0^2}{2} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (3.2.5)$$

En injectant ces développements dans les équations de Navier–Stokes compressibles (voir équation 2.1.1) adimensionnées, une première simplification est obtenue à partir des équations de quantité de mouvement : la pression thermodynamique  $p_0$  est constante en espace ( $\nabla p_0 = 0$ ). De plus, pour les écoulements ouverts considérés dans cette étude, nous pouvons supposer que la pression  $p_0$  est constante en temps également (les fluctuations de pression dynamique  $p_1$  sont négligeables par rapport à  $p_0$ ). L'équation d'énergie est également simplifiée et peut être combinée avec l'équation de continuité (voir aussi [Cook and Riley, 1996](#)) pour obtenir une équation d'évolution pour la masse volumique :

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = -\mathbf{v}_0 \cdot \nabla \rho_0 - \frac{1}{T_0} \left[ \frac{1}{RePr} \nabla \cdot (\mu \nabla T_0) \right], \quad \text{avec la lois d'état } p_0 = \rho_0 T_0. \quad (3.2.6)$$

Les équations de quantité de mouvement gardent la même forme que les équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\frac{\partial \rho_0 \mathbf{v}_0}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{v}_0 \otimes \mathbf{v}_0) = -\nabla p_1 + \frac{1}{Re} \nabla \cdot \vec{\tau}_0, \quad (3.2.7)$$

$$\tau_0 = -\frac{2}{3} \mu (\nabla \mathbf{v}_0) \cdot \vec{I} + \mu (\nabla \mathbf{v}_0 + \nabla^t \mathbf{v}_0),$$

ce qui permet d'envisager les mêmes techniques de résolution numérique. La seule difficulté technique supplémentaire est que la viscosité ( $\mu$ ) du fluide n'est plus une constante ; elle varie avec la température suivant la lois de Sutherland,  $\mu = T^b$ , avec  $b = 0.75$ . Pour une méthode d'intégration semi-implicite, ceci implique la modification des coefficients des matrices à inverser à chaque pas de temps, nécessitant un effort de calcul supplémentaire.

La forme finale des équation écrites en coordonnées cylindriques occupe trois pages dans le mémoire de thèse de [Benteboula \(2006\)](#) et ne sera pas développée ici. Je mentionnerai seulement quelques idées sur les algorithmes numériques mis en oeuvre pour la résolution de ces équations :

- Le domaine de calcul cylindrique et le maillage décalé (3.1) sont gardés pour la discrétisation spatiale des variables ; la nouvelle variable  $\rho$  sera stockée au centre de la maille.



### 3.2. Résolution numérique des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach

• L'équation (3.2.6) d'évolution de la masse volumique est une équation de convection-diffusion qui doit résoudre des gradients importants de  $\rho$ . Pour traiter les termes convectifs de l'équation, les schémas à variation totale décroissante (TVD, *Total Variation Diminishing*) sont adaptés à ce problème car les limiteurs de pente utilisés permettent d'éviter les oscillations et de garder  $0 < \rho \leq 1$ .

---

Nous avons utilisé un schéma développé par [Vreugenhil and Koren \(1993\)](#) pour des problèmes de combustion. Il s'écrit dans sa forme générale :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = \frac{\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}}{\delta x}, \quad (3.2.8)$$

avec

– pour  $v_{i+\frac{1}{2}} > 0$  le flux à la face  $i + \frac{1}{2}$  est calculé par :

$$\begin{cases} \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \left[ \rho_i + \frac{1}{2}\Phi(c_{i+\frac{1}{2}})(\rho_i - \rho_{i-1}) \right] v_{i+\frac{1}{2}}, \\ c_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_{i+1} - \rho_i + \varepsilon}{\rho_i - \rho_{i-1} + \varepsilon}, \end{cases} \quad (3.2.9)$$

– pour  $v_{i+\frac{1}{2}} < 0$  le flux à la face  $i + \frac{1}{2}$  est calculé par :

$$\begin{cases} \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \left[ \rho_{i+1} + \frac{1}{2}\Phi(c_{i+\frac{1}{2}})(\rho_{i+1} - \rho_{i+2}) \right] v_{i+\frac{1}{2}}, \\ c_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\rho_i - \rho_{i+1} + \varepsilon}{\rho_{i+1} - \rho_{i+2} + \varepsilon}, \end{cases} \quad (3.2.10)$$

avec  $\varepsilon = 10^{-11}$  et le limiteur

$$\Phi(c) = \max \left[ 0, \min \left( 2c, \min \left( \frac{1}{3} + \frac{2}{3}c + 2 \right) \right) \right]. \quad (3.2.11)$$


---

• Pour l'intégration des équations de quantité de mouvement (3.2.7) la même méthode de projection utilisée pour l'approche incompressible peut être gardée, avec quelques modifications, concernant notamment l'équation de correction de Poisson (3.1.6) qui a maintenant un terme source supplémentaire :

$$\mathcal{L}\Phi^{l+1} = \frac{1}{\alpha_l \Delta t} \left[ \mathcal{D}\vec{q}^l + \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^{n+1} \right]. \quad (3.2.12)$$

Le solveur de l'équation de Poisson reste le même (FFT+réduction cyclique) ce qui est un vrai avantage pour la programmation de la méthode.



### 3. Différences finies en coordonnées cylindriques : code JETLES

• Plusieurs schémas ont été développés dans Benteboula (2006) :

- 1- Un schéma totalement explicite d'Adams-Bashforth d'ordre deux en temps.
- 2- Un schéma prédictor-correcteur explicite d'Adams-Bashforth/Adams-Moulton d'ordre deux en temps.
- 3- Un schéma d'Euler explicite d'ordre un pour l'équation de la masse volumique et un schéma semi-implicite d'Adams-Bashforth/Crank-Nicolson d'ordre deux en temps.
- 4- Un schéma d'Euler explicite d'ordre un pour l'équation de la masse volumique et un schéma explicite d'Adams-Bashforth d'ordre deux en temps.

Des tests numériques intensifs ont montré que le schéma 4 apporte un gain de stabilité et de temps de calcul par rapport aux autres, pour le même taux de convergence (ordre deux en temps). De plus, ce schéma permet de simuler des écoulements avec de forts rapports de masse volumique, ce qui constitue un avantage par rapport aux autres schémas plus compliqués publiés dans la littérature. Quelques résultats de simulations extraits de la thèse de Benteboula (2006) seront présentés dans la section suivante.

## 3.3. Simulation de l'évolution d'un tourbillon toroïdal

### 3.3.1. Tourbillon toroïdal (vortex ring)

Le tourbillon toroïdal, appelé également anneau de vorticité ou désigné, par abus de langage, en utilisant le terme anglais de *vortex ring*, constitue un écoulement fondamental de la Mécanique des fluides, analysé théoriquement dans les ouvrages de référence (voir, par exemple, Saffman, 1992; Batchelor, 1988). Pour un article de synthèse sur le sujet, voir Shariff and Leonard (1992).

Les anneaux tourbillonnaires ont longtemps fasciné les chercheurs par leur comportement et leur beauté inhérente. Dans la nature, ils apparaissent sous différentes formes et tailles, l'exemple le plus familier étant les ronds de fumées émis par les fumeurs (suffisamment habiles). Ils se forment également suite à la décharge de sang dans le ventricule gauche du cœur humain, dans les éruptions volcaniques (figure 3.2), dans les sillages des oiseaux en vol, ou dans le milieu aquatique, pendant la propulsion de certains animaux (méduses) ou tout simplement dans le jeu des dauphins.

Je me suis intéressé à ce type d'écoulement pour des raisons plus pratiques, liés à sa présence dans les écoulements moteurs (voir aussi le chapitre 2). En effet, l'injection de carburant dans un moteur à *injection directe* (IDE), où la charge de carburant est diffusée directement dans la chambre de combustion, s'effectue par un



### 3.3. Simulation de l'évolution d'un tourbillon toroïdal

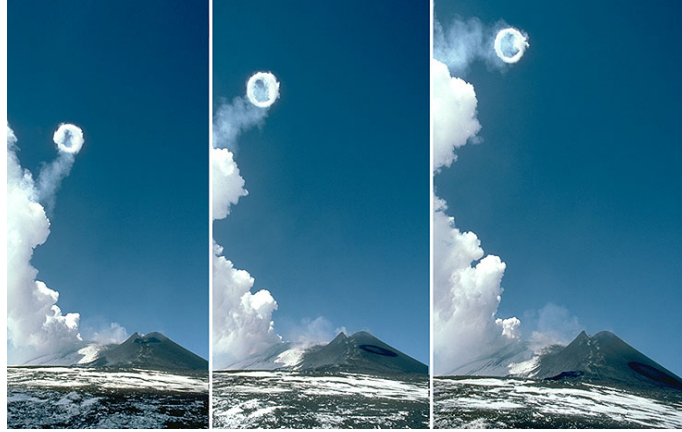


Figure 3.2.: Formation d'un anneau de fumée pendant l'éruption du volcan Etna (<http://www.stromboli.net>).

injecteur produisant un jet de gouttes (figure 3.3). Un tourbillon à symétrie axiale se forme en tête du jet d'injection ; il domine l'écoulement, même diphasique, et détermine les caractéristiques essentielles du processus d'injection (comme la longueur de pénétration du jet). L'objectif pratique étant de ramener la charge de fuel vers la bougie au moment de l'allumage, il est nécessaire de bien calculer et contrôler ces paramètres. Les codes de calcul utilisés dans l'industrie prennent en compte la complexité de l'écoulement et de la géométrie ; l'effort de calcul nécessaire joue parfois au détriment de la résolution précise de la dynamique de la phase gazeuse de l'écoulement. Ce propos est illustré par la figure (3.3) qui montre un exemple de calcul d'injection diphasique réalisé avec le code *KIVA-MB* de l'IFP, comparé avec le cas expérimental.

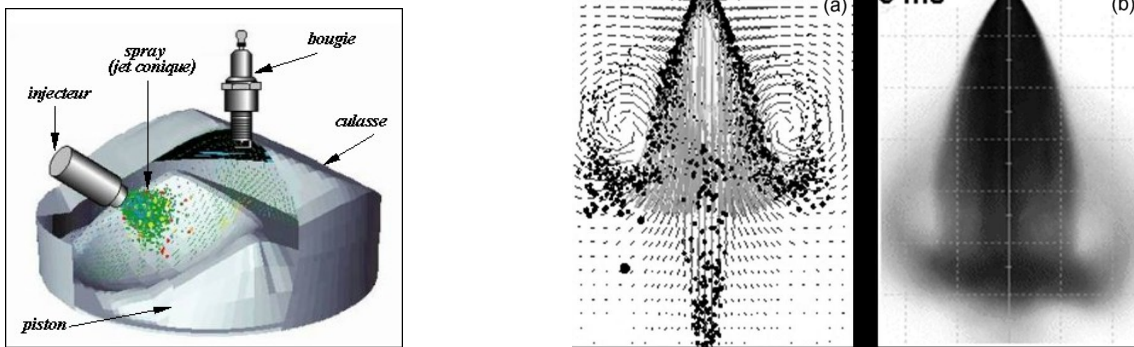


Figure 3.3.: Représentation schématique de l'injection dans un moteur à injection directe. (a) Simulation d'une injection diphasique réalisée avec le code *KIVA2-MB* de l'IFP. (b) Expérience correspondante effectuée à l'IFP. D'après Ballestra (2002).



### 3.3.2. Évolution du tourbillon toroïdal à masse volumique constante

En laboratoire, la méthode usuelle pour générer les anneaux tourbillonnaires consiste à éjecter de manière impulsive une colonne de fluide par un mécanisme piston-cylindre. L'anneau ainsi produit est rendu visible en introduisant un colorant (dans l'eau) ou une fumée (dans l'air) (figure 3.4). L'injection étant effectuée dans un milieu au repos, une couche de cisaillement (ou nappe de vorticit ) de forme cylindrique est g n r e au bord de la conduite. La p n tration du jet fluide dans le milieu au repos va engendrer l'enroulement de la nappe de vorticit  sous forme de tourbillon toro dal. C'est la phase de formation du vortex (figure 3.4). Apr s l'arr t de l'injection, l'anneau se d tache du g n rateur de vortex et se d place en aval par sa propre vitesse. Il grandit par diffusion visqueuse et entra nement du fluide ambiant. C'est la phase de post-formation.

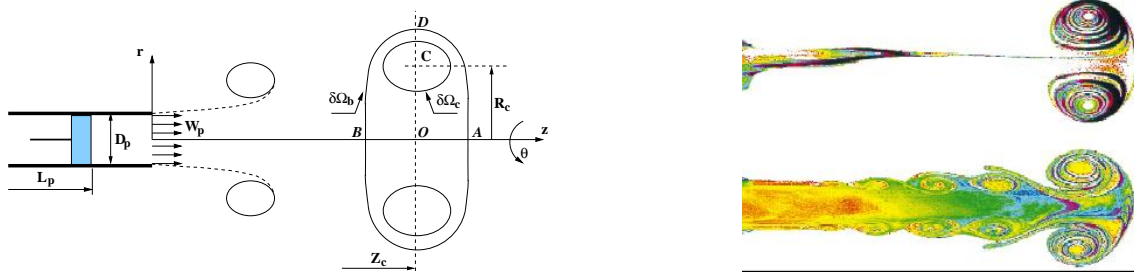


Figure 3.4.: Repr sentation sch matique des phases de formation et propagation d'un anneau tourbillonnaire. Visualisations exp rimentales de Gharib et al. (1998).

Si l'injection est de longue dur e, une instabilit  de Kelvin-Helmholtz de l' coulement de tra ne peut se produire, avec des ph nom nes plus complexes d'interaction entre tourbillons, comme le montre l'animation 3.5 dans le cas d'une injection annulaire.

Dans un article r cent (Danaila and H lie, 2008), nous apportons une contribution importante   la description de la phase de post-formation de l' volution du tourbillon toro dal. Utilisant des simulations axisym triques   haute r solution ( $301 \times 1251$ ), nous calculons les lois d' volution des principales caract ristiques du tourbillon (circulation, impulsion, vitesse de translation, etc). Les r sultats obtenus, en bon accord avec les r sultats exp rimentaux, nous ont permis de corriger les affirmations publi es dans la litt rature (Dabiri and Gharib, 2004) sur la description math matique de ces lois. Nous proposons  galement des diagnostics fins pour l'identification et la description du tourbillon, comme le calcul de la signature du vortex ou le calcul de la topologie du coeur du vortex.



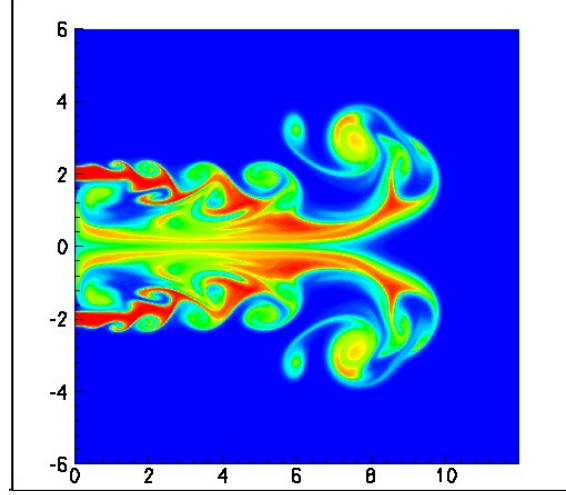


Figure 3.5.: (Animation) Naissance et interactions de tourbillons dans une injection annulaire de longue durée (évolution d'un traceur passif, simulation axisymétrique).

Enfin, nous comparons les résultats numériques avec les modèles théoriques existants (Norbury-Fraenkel et Kaplanski-Rudi), en mettant en évidence leurs caractéristiques d'intérêt pratique (figure 3.6).

---

À titre d'exemple, je présente un modèle de vortex ring intéressant, dérivé récemment par [Kaplanski and Rudi \(2005\)](#). Le vortex est identifié par le paramètre  $\tau = R_c/\ell$ , où  $R_c$  est le rayon du vortex et  $\ell$  l'échelle visqueuse. La vorticité est gaussienne,

$$\omega = \Omega \exp\left(-\frac{1}{2}(\sigma^2 + \eta^2 + \tau^2)\right) \mathbf{I}_1(\sigma\tau), \quad (3.3.1)$$

avec  $\sigma = r/\ell$ ,  $\eta = (z - Z_c(t))/\ell$  et  $Z_c$  la coordonnée axiale du vortex. Les expressions analytiques pour la circulation  $\Gamma$ , l'énergie  $E$  et la vitesse de translation  $W$  sont dérivées à partir des équations de Navier-Stokes par un calcul ingénieux faisant intervenir les fonctions de Bessel modifiées  $\mathbf{I}$  et les fonctions hyper-géométriques généralisées  ${}_2F_2$  :

---



$$\Gamma = \Gamma_0 \left( 1 - \exp \left( -\frac{\tau^2}{2} \right) \right), \quad \Gamma_0 = \frac{I}{\pi R_c^2}, \quad (3.3.2)$$

$$E = \frac{I^2}{2\pi^2} \frac{\tau}{R_c^3} \left( \frac{1}{12} \sqrt{\pi} \tau^2 {}_2F_2 \left( \left\{ \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\}, \left\{ \frac{5}{2}, 3 \right\}, -\tau^2 \right) \right), \quad (3.3.3)$$

$$W = \frac{I}{4\pi^2} \frac{\tau}{R_c^3} \left\{ 3\sqrt{\pi} \exp \left( -\frac{\tau^2}{2} \right) \mathbf{I}_1 \left( \frac{\tau^2}{2} \right) + \frac{1}{12} \sqrt{\pi} \tau^2 {}_2F_2 \left( \left\{ \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\}, \left\{ \frac{5}{2}, 3 \right\}, -\tau^2 \right) - \frac{3}{5} \sqrt{\pi} \tau^2 {}_2F_2 \left( \left\{ \frac{3}{2}, \frac{5}{2} \right\}, \left\{ 2, \frac{7}{2} \right\}, -\tau^2 \right) \right\}. \quad (3.3.4)$$

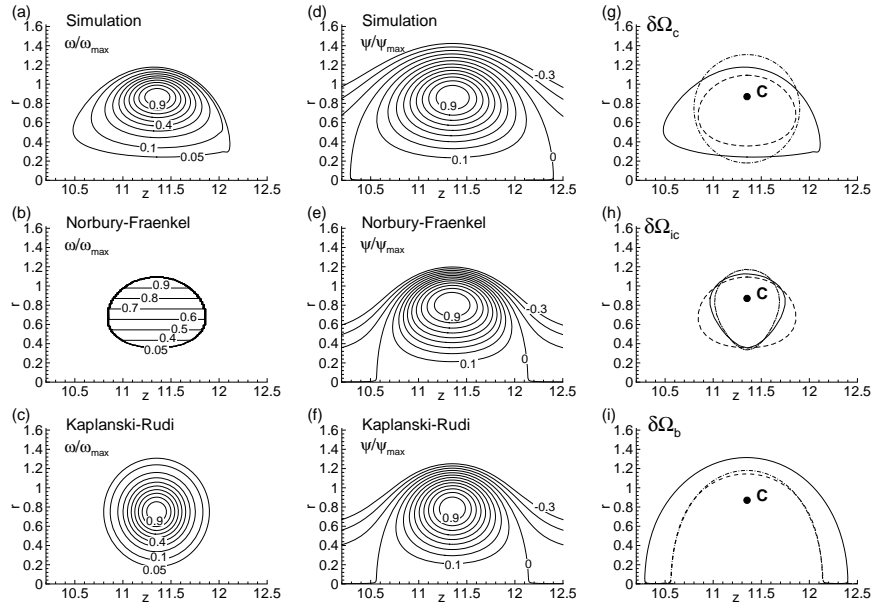


Figure 3.6.: Tourbillon toroïdal à masse volumique constante. Comparaison entre la simulation numérique et les modèles théoriques. Représentation de la vorticit  ( ), fonction de courant ( ) et de la topologie du vortex. D'apr s Danaila and H lie (2008).



### 3.3.3. Évolution du tourbillon toroïdal à masse volumique variable

La structure du tourbillon toroïdal change quand l'injection s'effectue à une température différente de celle du milieu ambiant (figure 3.3.3). Le paramètre d'étude dans ce cas est le rapport  $\alpha = T_j/T_a = \rho_a/\rho_j$  entre la température  $T_j$  du jet injecté et celle de l'ambiance  $T_a$ . Une large gamme de rapports  $\alpha \in [1/10, 10]$  a été explorée dans la thèse de Benteboul (2006), en mettant en évidence une large variété de topologies du vortex. La nouvelle dynamique, introduite par les effets de densité (couple barocline) a été analysée en détail par des diagnostics précis nécessitant le développement de programmes de post-traitement appropriés.

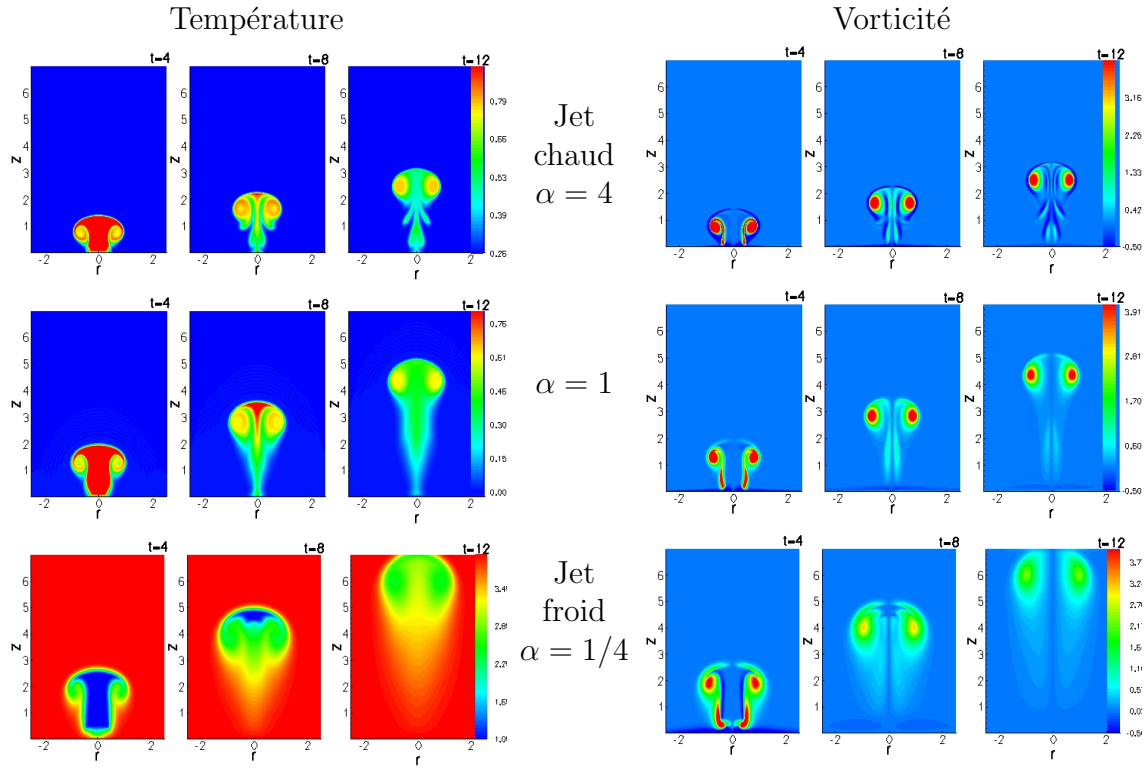


Figure 3.7.: Évolution des champs de vorticité et température pour différents cas d'injection à masse volumique variable. D'après Benteboul (2006).

D'un point de vue pratique, le rapport de températures  $\alpha$  affecte de manière importante les grandeurs à l'usage de l'ingénieur (longueur de pénétration, circulation du vortex, décroissance de la concentration sur l'axe, etc.) La figure 3.8 montre que la longueur de pénétration a une évolution quasi-linéaire avec une pente qui, comme attendu, est plus grande pour le jet fluide froid qui avance plus rapidement dans le milieu moins dense. La conséquence directe de ce phénomène est la diminution des vitesses de propagation du front du jet avec  $\alpha$ . Plus le fluide injecté est froid, plus



### 3. Différences finies en coordonnées cylindriques : code JETLES

la circulation est importante (figure 3.8) ; l'enroulement du tourbillon dans le cas du jet chaud est freiné par le couple barocline.

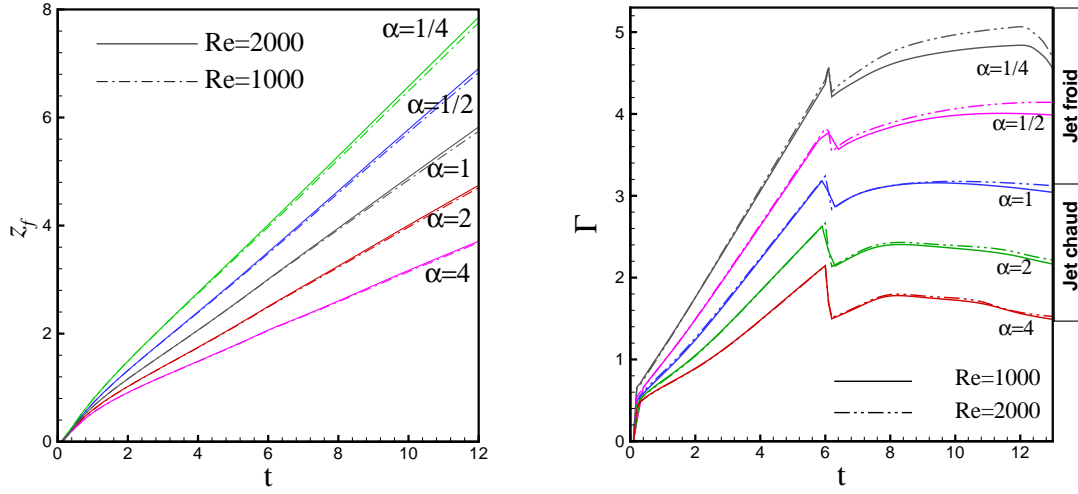


Figure 3.8.: Évolution de la longueur de pénétration et de la circulation pour différents cas d'injection à masse volumique variable. D'après Benteboula (2006).

Je mentionne, pour finir cette partie, que, ce type de résultats n'étant pas disponibles dans la littérature (ni théorique, ni numérique), nous avons utilisé pour la validation des premiers calculs le code en coordonnées sphériques de B. J. Boersma (présenté aussi dans la section 1.2) dans sa version à faible nombre de Mach. Ces résultats sont présentés en détail dans Benteboula (2006); Benteboula and Danaila (2007); Danaila and Benteboula (2004); Benteboula and Danaila (2006).



## 4. Travaux en cours et perspectives

Je présente dans ce chapitre mes travaux en cours et les projets de recherche ayant comme principale application l'étude des écoulements fluides *classiques*. Les problèmes actuellement à l'étude sont organisés en trois sujets majeurs :

- Analyse numérique et mathématique de modèles de vortex.
- Analyse numérique et modélisation de la zone de proche entrée d'une conduite.
- Développement de schémas numériques dans JETLES : simulation de l'injection conique.

La panoplie des codes numériques dont je dispose pour la simulation des écoulements fluides sera élargie par l'utilisation du logiciel FreeFem++, dans sa version 2D pour l'instant.

Je mentionne également les nouvelles collaborations sur ces sujets avec :

[S. Serfaty](#) (Professeur associé à l'UPMC),  
[N. Le](#) (post-doc, University of Columbia, USA),  
[S. Danaila](#) (Professeur à Université Polytechnique de Bucarest),  
[C. Vadean](#) (étudiant en thèse à Bucarest),  
[J. Hélié](#) (Continental Automotive France).

### 4.1. Analyse numérique et mathématique de modèles de vortex

Dans [Danaila and Hélié \(2008\)](#), nous avons analysé la pertinence des modèles théoriques de vortex par rapport aux résultats numériques haute résolution. Le modèle le plus utilisé dans la littérature, celui de Norbury–Fraenkel, repose seulement sur les données numériques discrètes tabulées de [Norbury \(1973\)](#), ce qui rend difficile leur utilisation. De plus, les algorithmes numériques développés pour ce problème dans les années 70-80 sont assez difficiles à utiliser. Je me suis donc proposé de revoir le travail numérique sur la théorie des tourbillons stationnaires axisymétriques.

Une motivation de ce travail vient d'un problème pratique, rencontré même dans les applications industrielles (figure [4.1](#)). La mesure du champ de vitesse d'un spray



#### 4. Travaux en cours et perspectives

généralisé pendant l'injection dans un moteur utilise souvent la technique PIV (*Particle Image Velocimetry*). Comme l'écoulement est diphasique, la concentration des particules de carburant dans le tourbillon de tête rend cette région de l'écoulement complètement opaque. Un système numérique pour la construction du champ de vitesse manquant serait de grande utilité pratique. Ce problème se rencontre aussi dans l'étude des plasmas dans les réacteurs Tokamak, quand la reconstruction de la fonction de courant implique des équations elliptiques similaires (Blum et al., 2007).

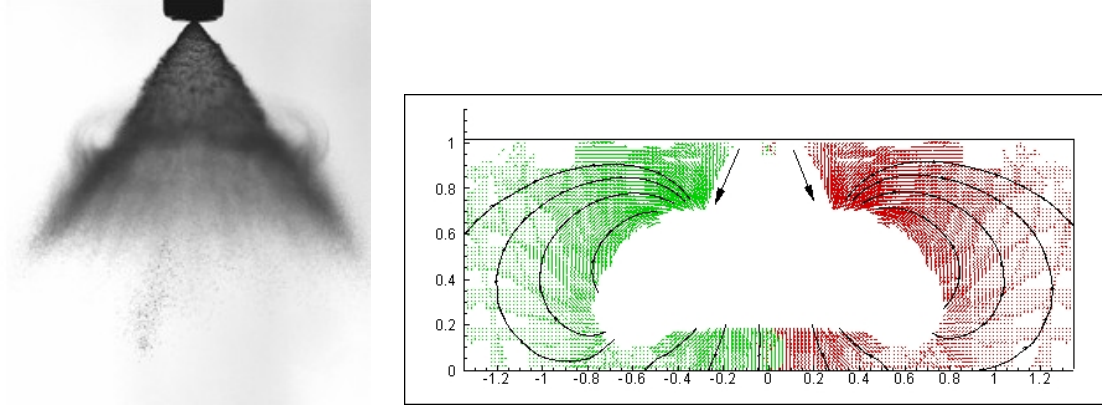


Figure 4.1.: Spray généré par les injecteurs essence et mesures PIV du champ de vitesse. Communiqués par J. Hélie, Continental Automotive France.

L'idée d'utiliser le logiciel FreeFem++ (<http://www.freefem.org>), développé au Laboratoire Jacques-Louis Lions par F. Hecht, O. Pironneau et A. LeHyaric, semble naturelle dans ce contexte, car le problème est elliptique, formulé en deux dimensions de l'espace. FreeFem++ propose un langage utilisateur très intuitif pour la résolution des équations aux dérivées partielles avec toute une panoplie de méthodes de type éléments finis. Quelques schémas numériques utilisés dans le logiciel sont aussi présentés dans l'ouvrage [O3].

Le système numérique implique une partie de modélisation, ce qui nous ramène à revoir la théorie mathématique des tourbillons axisymétriques. Dans l'hypothèse d'un fluide idéal (non-visqueux), le modèle théorique pour l'anneau de vorticit   implique l'analyse de l'  quation elliptique non-lin  aire

$$\mathcal{L}\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \begin{cases} -r^2 f(\psi), & \text{in } \Omega_c \\ 0, & \text{in } \Pi \setminus \bar{\Omega}_c, \end{cases} \quad (4.1.1)$$

o    $\Pi = \{(z, r) | r > 0\}$  est le demi-plan. L'inconnue  $\psi$  est la fonction de courant et le domaine  $\Omega_c$  repr  sente le coeur du vortex (figure 4.2).  $\Omega_c$  constitue le support de la vorticit  , mod  lis  e par la fonction  $f(\psi)$ . Les contraintes suppl  mentaire suivantes doivent   tre prises en compte :



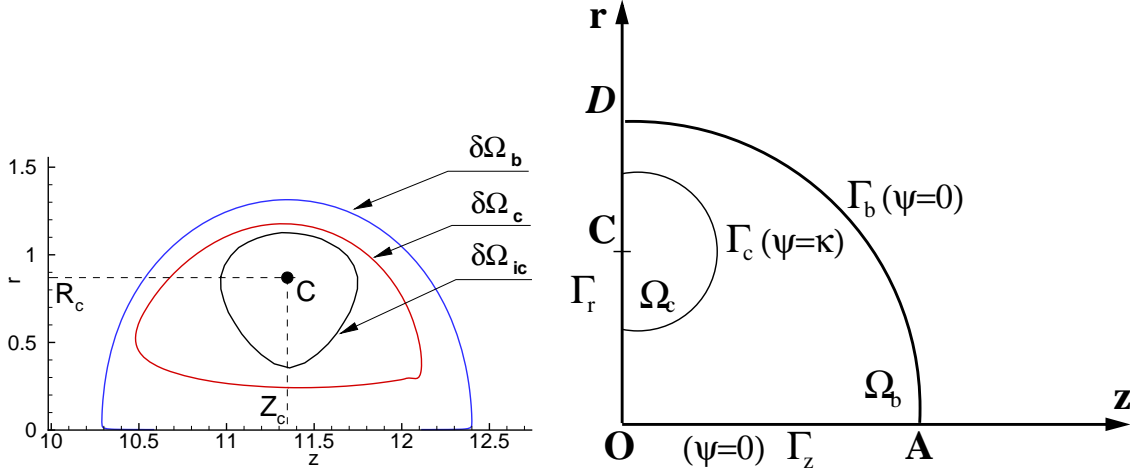


Figure 4.2.: Structure du tourbillon toroïdal donnée par la simulation numérique directe et formulation du problème du modèle de vortex.

- $\psi$  et  $\nabla\psi$  sont continues sur  $\delta\Omega_c$  ;
- $\psi = k$  sur  $\delta\Omega_c$  qui doit être une ligne de courant,
- la vitesse de translation  $W$  doit être retrouvée à l'infini :

$$\psi + \frac{1}{2}Wr^2 \rightarrow 0 \quad \text{pour} \quad r^2 + z^2 \rightarrow \infty. \quad (4.1.2)$$

La difficulté du problème vient du fait qu'il se pose sur le demi-plan  $\Pi$  et que la frontière  $\delta\Omega_c = \Gamma_c$  est libre et doit être calculée. Sous certaines hypothèses, des résultats d'existence de solutions ont été trouvés dans les années 70–80 ([Fraenkel and Berger, 1974](#); [Esteban, 1983](#)). Pour des formulations plus proches de problèmes réels, le problème général permet seulement des conjectures mathématiques (pour une discussion, voir [Berestycki et al., 1984](#)).

Dans un premier temps, j'ai attaqué le problème plus simple obtenu en fixant le domaine définissant le *bulbe* du tourbillon, ou *vortex bubble*, ( $\delta\Omega_b$ ). Le cœur du vortex  $\delta\Omega_c$  (voir figure 4.2) sera calculé, ce qui est relevant pour l'application pratique considérée. L'algorithme numérique développé est très efficace, avec une convergence beaucoup plus rapide que celle des méthodes présentées dans la littérature ([Durst et al., 1981](#)). Un exemple de résultat pour le cas  $f(\psi) = Cr$ , avec  $C$  une constante, est présenté sur la figure 4.3 qui montre également la convergence rapide de l'algorithme.

En collaboration avec [S. Serfaty](#) (UPMC) et [N. Le](#) (University of Columbia, USA) nous avons commencé à travailler sur l'estimation théorique des paramètres critiques qui définissent le domaine d'existence de solutions non-nulles. Une telle estimation précise n'existe pas dans la littérature. Nous regardons en ce moment comment raffiner les prédictions théoriques pour s'approcher plus des valeurs trouvées numériquement.



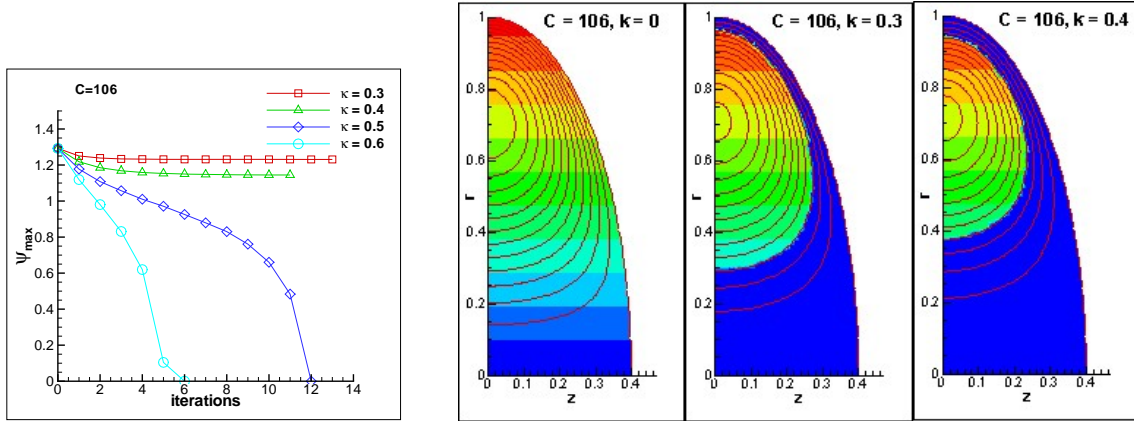


Figure 4.3.: Tourbillon axisymétrique de forme elliptique. Convergence de l'algorithme et solutions pour différents jeux de paramètres. Simulations avec FreeFem++.

La suite de cette étude portera sur les algorithmes numériques pour le problème général et sur la résolution du problème de reconstruction (par un algorithme rapide, en temps réel, exploitable par les expérimentateurs) du champ de vitesse présenté sur la figure 4.1.

## 4.2. Analyse numérique et modélisation de la zone de proche entrée d'une conduite

La simulation du tourbillon toroïdal présentée dans la section 3.3 dépend de la modélisation des conditions aux limites à l'entrée du domaine de calcul. Dans [Danaïla and Hélie \(2008\)](#), nous imposons un profil de vitesse qui approche les profils expérimentaux, mais qui peut être encore amélioré. La meilleure manière de procéder est de simuler l'écoulement en amont du générateur de vortex. Cette technique est coûteuse en termes de temps de calcul et une alternative est de modéliser analytiquement ou numériquement cet écoulement qui se développe dans la zone de proche entrée d'une conduite (figure 4.4). D'un point de vue numérique, le code JETLES peut être facilement adapté à ce type de configurations en modifiant les conditions aux limites. Le travail a d'ailleurs commencé, suite au stage d'un mois effectué au laboratoire en 2008 par [C. Vadean](#), étudiant en thèse à l'Université Polytechnique de Bucarest. Les premiers résultats (figure 4.5) ont été validés et constituent une base numérique importante pour la modélisation de cet écoulement.

D'un point de vue analytique, la forme du profil présenté dans la figure 4.1 sera déduit en résolvant les équations de Navier-Stokes simplifiées pour décrire ce type d'écoulement. Il faut rappeler le fait que dans cette zone, contrairement à la zone



#### 4.2. Analyse numérique et modélisation de la zone de proche entrée d'une conduite

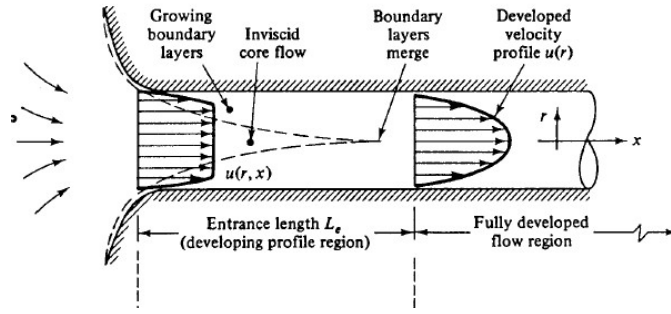


Figure 4.4.: Représentation schématique de l'écoulement laminaire dans une conduite.

développée (Poiseuille), les effets instationnaires dominent, ce qui nous ramène à chercher un profil qui dépend du temps et deux variables d'espace ( $r, z$ ). Des développements pour ce cas n'existent pas dans la littérature (voir [Fargie and Martin, 1971](#); [Das and Arakeri, 1998](#)).

Plusieurs techniques sont actuellement étudiées : linéarisation des équations et développement de la solution en séries de fonctions de Bessel ou des approches de type couche limite avec raccordement par développements asymptotiques. Une collaboration avec [S. Danaila](#) de l'Université Polytechnique de Bucarest est envisagée par l'intermédiaire d'une co-tutelle de thèse.

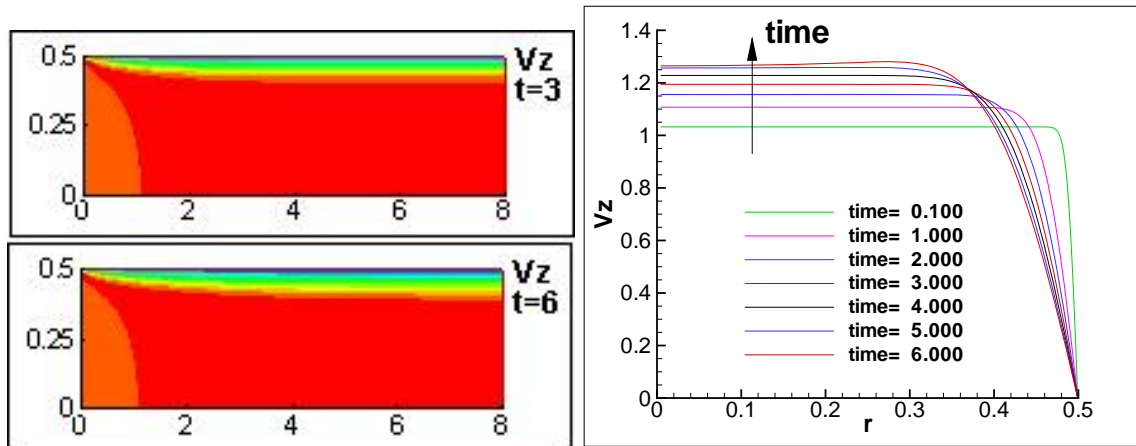


Figure 4.5.: Écoulement laminaire dans la zone de proche entrée d'une conduite. Contours et profils de vitesse longitudinale  $V_z$ . Simulation avec le code JETLES.



### 4.3. Développement de schémas numériques dans JETLES : simulation de l'injection conique

Le développement du code JETLES [Code2] se poursuivra en privilégiant à la fois les analyses théoriques (comportement des schémas d'ordre élevé dans le code, utilisation de nouvelles conditions aux limites) et les aspects techniques (optimisation du code pour la simulation 3D, parallélisation).

Il faut souligner le fait que ce code académique constitue le support idéal pour tester des schémas numériques et pour valider des développements théoriques. À titre d'exemple, je compte explorer numériquement les nouvelles théories développées par Sani et al. (2006) et Pironneau and Gresho (2008) sur les conditions aux limites. C'est un sujet d'autant plus intéressant que la théorie classique due à Gresho and Sani (2000) est mise en défaut par ces récents développements.

Une nouvelle classe d'écoulements simulés avec JETLES sera constituée par l'injection conique à masse volumique constante ou variable. Ce cas se rapproche plus de celui de l'injection dans les moteurs d'automobile de dernière génération (voir figure 4.1). Nous simulerons, en collaboration avec C. Vadean (étudiant en thèse à Bucarest), ce type d'écoulements en utilisant le code JETLES. Les premiers résultats obtenus (voir l'animation 4.6) sont très encourageants, ce qui laisse présager de nouveaux sujets d'analyse. Ce sujet intéresse Continental Automotive, un des principaux producteurs

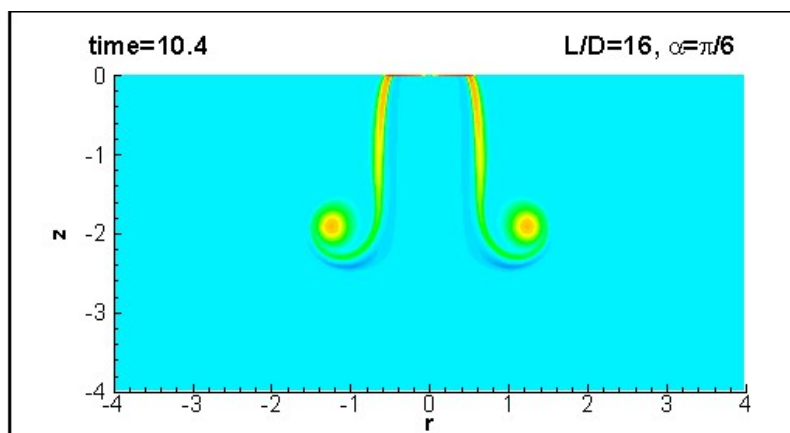


Figure 4.6.: (Animation) Injection conique – évolution de la vorticit . Simulation avec le code JETLES.

d'injecteurs d'automobile. Le sujet a  t   galement int gr  dans une proposition de projet ANR PREDIT 2008 *Programme v hicules pour les transports terrestres*, les autres partenaires  tant : Continental Automotive, LMFA  cole Centrale de Lyon, CORIA/INSA Rouen et FLUOREM.



## **II**

# **Simulations de systèmes super-fluides : condensats de Bose-Einstein**







# 5. Étude numérique de tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

## Présentation générale

---

Cette activité de recherche, inédite pour moi, a débuté en 2001 dans le cadre d'un projet *Jeunes chercheurs* CNRS coordonné par [Amandine Aftalion](#). À l'époque où le débat sur la forme de la ligne de tourbillon (*vortex*) observée expérimentalement dans les condensats de Bose-Einstein donnait naissance à de nombreux travaux théoriques, les simulations numériques tridimensionnelles (3D) faisaient cruellement défaut. Seulement deux études numériques de ce type existaient ([García-Ripoll and Pérez-García, 2001](#)) (le preprint de [Modugno et al., 2003](#)), basées sur des méthodes peu robustes quand il s'agissait de simuler plusieurs vortex dans le condensat. Je me suis alors lancé le défi de construire un code de calcul pour ce problème, en m'inspirant des méthodes déjà expérimentées pour la simulation des fluides *classiques*. Le code BETI (*Bose-Einstein en Temps Imaginaire*) est le résultat de plusieurs mois de développement intensif et reste même aujourd'hui un des rares codes 3D qui peuvent simuler des configurations proches de celles expérimentales.

À part l'aventure *numérique* occasionnée par ce projet, la découverte de la physique des condensats de Bose-Einstein m'a offert beaucoup de moments d'émerveillement. Partant avec une intuition physique forgée sur les écoulements *classiques*, il m'a été très difficile tout au début de saisir la nature des tourbillons quantiques. Heureusement, les discussions avec [Jean Dalibard](#) et les membres de son groupe *Atomes froids* ([Vincent Bretin](#), [Sabine Stock](#)) du Laboratoire Kastler-Brossel (LKB) de l'ENS m'ont offert les éclaircissements nécessaires à la compréhension de la physique. Avec à la fin, la grande satisfaction de les voir intéressés par mes résultats numériques et impatients de me proposer de nouvelles configurations de calcul correspondant à leurs expériences en cours.

Une autre collaboration intéressante occasionnée par cette activité a été celle avec [Lucian Crasovan](#) de l'Université "Politecnica de Catalunya" de Barcelona et [Victor Pérez-García](#) de l'Université de Castilla-La Mancha. Nous avons regardé et simulé ensemble des configurations de vortex *exotiques* que nous espérons voir un jour dans



## 5. Simulations de tourbillons dans un condensat de Bose-Einstein

les expériences. J'ai également apprécié les discussions avec [Qiang Du](#) de Penn State sur les techniques numériques qu'il avait développées pour les simulations 2D.

Les simulations 3D présentées dans cette partie ont fait l'objet de plusieurs publications dans les revues de physique. Il faut savoir qu'il s'agit d'un domaine de recherche à dynamique très rapide et concurrentielle, accélérée depuis le prix Nobel de 2001. Les expériences se multiplient, ainsi que les études théoriques qui impliquent de plus en plus de mathématiciens.

Après une brève présentation des configurations expérimentales de condensat de Bose-Einstein en rotation et de la notion de tourbillon quantique, je décris dans ce chapitre la méthode numérique pour l'intégration en temps imaginaire de l'équation de Gross-Pitaevskii 3D. Les nombreux résultats obtenus seront montrés dans le chapitre suivant.

**Mots clés :** différences finies, schémas compacts, équation de Gross-Pitaevskii, condensat de Bose-Einstein, tourbillon quantique.

**Points forts :** Réalisation d'un code de simulation 3D. Délégation de 6 mois au CNRS en 2004 pour développer cette activité de recherche. L'étude a fait partie de l'ACI *Nouvelles Interfaces des Mathématiques* intitulée *Contributions mathématiques pour les condensats de Bose Einstein* (2003-2005).

**Publications :** articles : [A3], [A6, A7, A9, A10],  
codes calcul : [Code1].

**Collaborations :** A. Aftalion (CNRS, Lab. Jacques-Louis Lions),  
L. C. Crasovan (Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona),  
J. Dalibard, S. Stock, V. Bretin (Lab. Kastler Brossel, ENS),  
Q. Du (Penn State University, USA),  
V. M. Pérez-García (University of Castilla-La Mancha).

---



## 5.1. Réalisations expérimentales du condensat de Bose-Einstein

Les condensats de Bose-Einstein doivent leur nom à la prédiction de Bose et Einstein qui dit que dans un gaz d'atomes identiques et sans interaction à très basse température, une fraction importante du gaz doit s'accumuler dans le même état quantique d'énergie minimale. Les fonctions d'ondes des particules sont suffisamment étendues pour se recouvrir entre elles pour que l'ensemble macroscopique d'atomes forme un seul *super-atome* décrit par une fonction d'onde unique, dont l'évolution est gouvernée par une équation de Schrödinger non-linéaire. La propriété de cohérence remarquable du condensat laisse entrevoir des applications pratiques du domaine de la science-fiction actuellement : des lasers à atomes, capables de délivrer un faisceau cohérents d'atomes, à l'instar des lasers de lumière, des horloges avec une précision inimaginable pour équiper les instruments de mesure et de localisation (GPS), etc.

La recherche de systèmes expérimentaux proches du modèle d'Einstein a conduit à la première réalisation expérimentale d'un condensat de Bose-Einstein en 1995 par une équipe américaine du Colorado, dirigée par Eric Cornell et Carl Wieman. Ils ont été récompensés, avec W. Ketterle (MIT), par le prix Nobel en 2001. Depuis, de nombreuses propriétés de ces systèmes sont étudiées expérimentalement et théoriquement, notamment au laboratoire Kastler-Brossel (LKB) de l'ENS (voir la page Web <http://www.lkb.ens.fr/-Condensats-de-Bose-Einstein->).

La preuve de la superfluidité du condensat de Bose-Einstein a constitué un premier sujet majeur de recherche. L'existence de courants permanents dans le condensat, qui est une conséquence de la superfluidité, a été mise en évidence par des expériences au MIT (Raman et al., 1999), consistant à déplacer un faisceau laser dans le condensat.

La démarche expérimentale réalisée au LKB (figure 5.1) est différente et consiste à mettre en rotation le piège qui confine les atomes pour faire apparaître des tourbillons (*vortex*) quantiques (Madison et al., 2000, 2001). En effets, la rotation en bloc d'un superfluide n'est pas possible : il a le choix entre rester immobile ou nucléer des vortex quantiques. Cette démarche a été reproduite au MIT (Abo-Shaeer et al., 2001) pour d'autres atomes.

Pour l'expérience du LKB schématisée sur la figure 5.1, les atomes sont confinés dans un piège harmonique en rotation à la vitesse  $\Omega$ . Le piège étant défini par une fréquence  $\omega_z$  beaucoup plus petite que  $\omega_x$  et  $\omega_y$ , le condensat prend une forme de cigare. On observe expérimentalement que lorsque  $\Omega$  est petit, il n'y a pas de vortex dans le système. Lorsqu'on augmente  $\Omega$  un tourbillon apparaît dans le condensat.



## 5. Simulations de tourbillons dans un condensat de Bose-Einstein

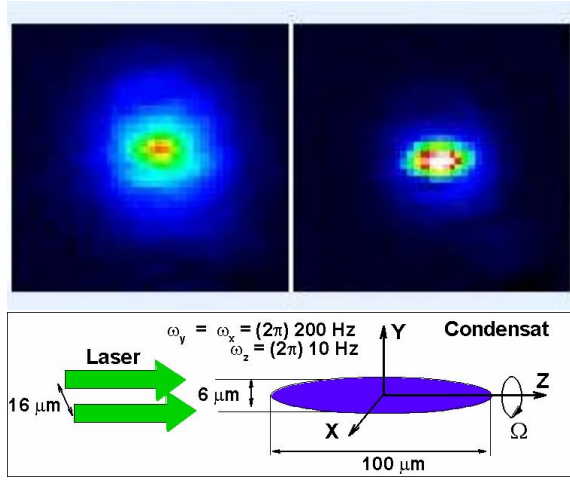


Figure 5.1.: Condensat de Bose-Einstein réalisé au Laboratoire Kastler-Brossel de l'ENS (<http://www.lkb.ens.fr>) et configuration de condensat en rotation étudié expérimentalement au LKB.

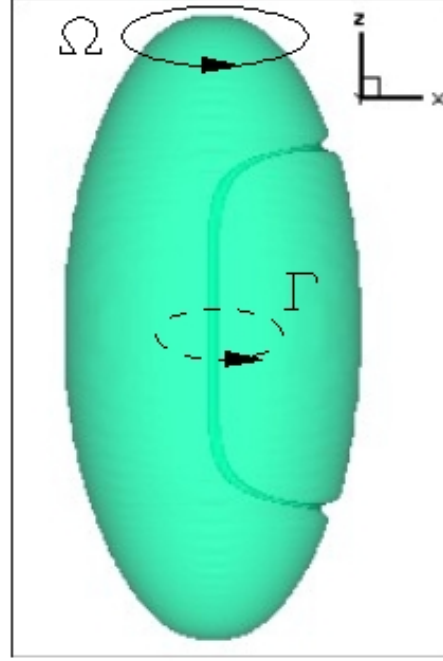


Figure 5.2.: (Animation) Ligne de vortex dans un condensat de Bose-Einstein.

Si le condensat est décrit par la fonction d'onde macroscopique

$$\psi = \sqrt{\rho(x, y, z)} e^{i\theta(x, y, z)}, \quad (5.1.1)$$

avec  $\rho$  la densité atomique locale et  $\theta$  la phase, le tourbillon quantique est un défaut topologique de  $\psi$ . Autrement dit,  $\rho = 0$  le long de la ligne de vortex et la phase autour est discontinue. Dans l'analogie fluide, la vitesse locale est définie (dans un domaine où  $\rho \neq 0$ ) comme

$$\mathbf{v} = \frac{h}{2\pi m} \nabla \theta = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta, \quad (5.1.2)$$

où  $h$  est la constante de Planck et  $m$  la masse atomique. Par le théorème de Stokes la circulation est nulle partout ( $\nabla \times \mathbf{v} = 0$ ) sauf sur un contour entourant la ligne de vortex (figure/animation 5.2). Comme la fonction d'onde doit être uni-valuée, le saut de phase à chaque tour doit être un multiple de  $2\pi$ . Par conséquent, les valeurs admissibles de la circulation du vortex sont

$$\Gamma = \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = n \frac{h}{m}, \quad (5.1.3)$$



avec  $n$  entier. Cette quantification de la circulation du vortex différencie les vortex quantiques de ceux rencontrés dans les fluides classiques. L'écoulement autour de la singularité de phase est souvent appelé *supercourant*.

D'un point de vue numérique, il s'ensuit de la description précédente qu'un moyen rapide d'identification des lignes de vortex est de visualiser les iso-surfaces de faible (proche de zéro) densité atomique  $\rho = |\psi|^2$ , comme dans la figure 5.2. La recherche des discontinuités de phase donne ensuite la valeur de  $n$  (il vaut 1 dans ce cas). Remarquons que cette méthode visualise aussi la frontière du condensat, car  $\rho = 0$  à l'extérieur.

Quand la vitesse de rotation augmente, de plus en plus de vortex sont nucléés dans le condensat. Ils s'arrangent dans une structure ordonnée, appelée réseau d'Abrikosov. La figure 5.3 montre un tel réseau obtenu expérimentalement au JILA, Université de Colorado.

Remarquons, pour défendre ma cause, que l'observation expérimentale des détails des lignes de vortex à l'intérieur d'un si petit objet est une mission très difficile, voir impossible dans certains cas. D'où l'intérêt pour les simulations 3D.

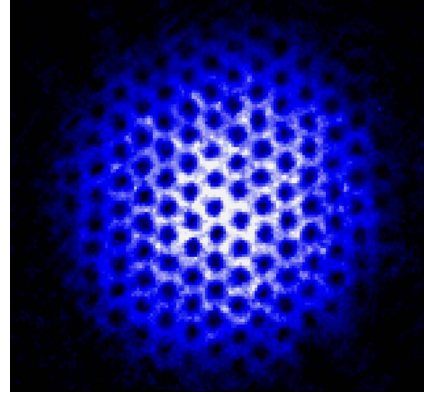


Figure 5.3.: Réseau d'Abrikosov de tourbillons quantiques. Expériences effectuées au JILA, Université de Colorado (<http://jilawww.colorado.edu>).

## 5.2. Modèle théorique

Les condensats atomiques obtenus à partir de métaux alcalins sont caractérisés par une densité non uniforme, imprimée par le potentiel de piégeage qui confine les atomes. En même temps, les condensats atomiques sont purs et dilués si bien que les interactions sont faibles. Pour ces raisons, une très bonne approximation théorique est de considérer que tous les atomes sont décrits par une même fonction d'onde qui évolue selon l'équation de Gross-Pitaevskii qui est une équation de Schrödinger non linéaire avec un terme supplémentaire qui décrit le piégeage.

On se place dans le référentiel tournant (figure 5.1) et on considère que les atomes interagissent par le potentiel effectif  $\mathbf{V}(r_1 - r_2) = g\delta(r_1 - r_2)$ . Si  $N$  est le nombre de particules dans le condensat, tous les atomes seront décrits par la même fonction



## 5. Simulations de tourbillons dans un condensat de Bose-Einstein

d'onde  $\psi$  qui minimise l'énergie suivante

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathcal{D}} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V_{trap} |\psi|^2 + \frac{N}{2} g_{3D} |\psi|^4 - \hbar \mathbf{\Omega} \cdot (i\psi, \nabla \psi \times \mathbf{x}), \quad (5.2.1)$$

sous la contrainte  $\int |\psi|^2 = 1$ . On suppose que  $\mathbf{\Omega} = \Omega \mathbf{e}_z$ . La fonction d'interaction est  $g_{3D} = 4\pi \hbar^2 a_s / m$ , où  $a_s$  est la longueur de diffusion (*scattering length*). Le potentiel de piégeage a généralement une forme harmonique

$$V_{trap}(x, y, z) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \quad (5.2.2)$$

avec  $\omega_{x,y,z}$  les fréquences suivant chaque direction de l'espace. Nous verrons dans le chapitre suivant d'autres formes du potentiel  $V_{trap}$ . Dans l'équation (5.2.1), le premier terme est un terme d'énergie cinétique, le suivant le terme de piégeage, puis vient le terme d'interaction et enfin le terme dû au changement de référentiel.

Un important travail de modélisation a été réalisé au laboratoire Jacques-Louis Lions par [A. Aftalion](#) et ses collaborateurs ([Aftalion and Du, 2001](#); [Aftalion and Jerrard, 2002](#); [Aftalion and Riviere, 2001](#)). Dans l'équation (5.2.1), les grandeurs physiques sont adimensionnées suivant les expressions ([Aftalion and Riviere, 2001](#))

$$d = \left( \frac{\hbar}{m\omega_x} \right)^{1/2}, \quad \varepsilon = \left( \frac{d}{8\pi N a} \right)^{2/5}, \quad R = \frac{d}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad (5.2.3)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{x}/R, \quad u(\mathbf{r}) = R^{3/2} \phi(\mathbf{x}),$$

$$\tilde{\Omega} = \Omega / (\varepsilon \omega_x), \quad \alpha = \omega_y / \omega_x, \quad \beta = \omega_z / \omega_x.$$

L'énergie sans dimension devient

$$E(u) = H(u) - \tilde{\Omega} L_z(u), \quad (5.2.4)$$

où  $H$  est l'Hamiltonien

$$H(u) = \int \frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2} V(\mathbf{r}) |u|^2 + \frac{1}{4\varepsilon^2} |u|^4, \quad (5.2.5)$$

$V$  le potentiel de piégeage adimensionné et  $L_z$  le moment angulaire

$$L_z(u) = i \int \bar{u} \left( y \frac{\partial u}{\partial x} - x \frac{\partial u}{\partial y} \right). \quad (5.2.6)$$

Le paramètre  $\varepsilon$  joue le rôle de petit paramètre asymptotique pour l'étude du condensat dans le régime de Thomas-Fermi. Les problèmes physiques se traduisent en terme mathématique par : trouver les minima de  $E(u)$ , déterminer en fonction de la valeur de  $\Omega$  si le minimum présente ou non des vortex, localiser les vortex et décrire leur forme. Les résultats théoriques portent essentiellement sur le développement formel de l'énergie (5.2.4) en fonction de  $\varepsilon$  pour différents niveaux d'approximation. Pour une revue de ces développements mathématiques, voir l'ouvrage récent d'[Amandine Aftalion](#) ([Aftalion, 2006](#)).



### 5.3. Modèle numérique

La recherche numérique de points critiques de l'énergie  $E_{3D}(u)$  (5.2.4) peut se faire, soit en minimisant directement la fonctionnelle par des méthodes de type gradient conjugué (Modugno et al., 2003) ou gradients de Sobolev (García-Ripoll and Pérez-García, 2001), soit en travaillant avec l'équation d'Euler-Lagrange correspondante. J'ai choisi d'utiliser la deuxième approche, plus flexible et robuste quand il s'agit de trouver des états critiques avec plusieurs vortex dans un condensat 3D.

L'équation d'Euler-Lagrange dérivée de (5.2.4) sera avancée en *temps imaginaire* (en rajoutant le terme  $\partial u / \partial t$ ) jusqu'à la convergence vers un état stationnaire correspondant à un état d'équilibre du condensat. Il faut donc intégrer l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{2} \nabla^2 u + i(\tilde{\Omega} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla u = -\frac{1}{2\varepsilon^2} u(V + |u|^2) + \mu_\varepsilon u, \quad (5.3.1)$$

sur un domaine spatial  $\mathcal{D}$ , avec des conditions aux limites de Dirichlet  $u = 0$  sur  $\partial\mathcal{D}$ . Le multiplicateur de Lagrange  $\mu_\varepsilon$  est calculé pour respecter la contrainte de norme unité  $\int_{\mathcal{D}} |u|^2 = 1$  :

$$\mu_\varepsilon = \int_{\mathcal{D}} \left\{ \frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{2\varepsilon^2} (V + |u|^2) |u|^2 \right\} - \tilde{\Omega} L_z.$$

Le domaine de calcul  $\mathcal{D}$  est rectangulaire (figure 5.4). Ses dimensions sont estimées à partir de l'approximation de Thomas-Fermi (TF) pour la densité :

$$\rho_{\text{TF}}(r, z) = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a_s} \left( \mu - V_{\text{trap}}(r, z) + \frac{1}{2} m \Omega^2 r^2 \right), \quad (5.3.2)$$

où  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  et  $\mu$  le potentiel chimique calculé analytiquement à partir de la contrainte

$$\int_{\{\rho_{\text{TF}} > 0\}} \rho_{\text{TF}}(\mathbf{r}) = 1. \quad (5.3.3)$$

Les dimensions du condensat (le rayon transversal  $R_\perp$  et la demi-longueur  $R_z$ ) sont calculées à partir de (5.3.3). Le domaine de calcul  $\mathcal{D}$  doit être suffisamment grand pour permettre à la fonction d'onde de relaxer vers zéro aux bords du domaine.

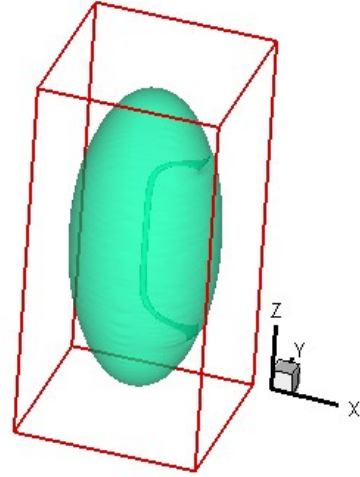


Figure 5.4.: Domaine de calcul pour la simulation avec le code BETI.



## 5. Simulations de tourbillons dans un condensat de Bose-Einstein

L'équation (5.3.1) est avancée dans le temps imaginaire en utilisant un schéma hybride Runge-Kutta-Crank-Nicolson à trois pas, inspiré par mes travaux sur la simulation des fluides classiques (section 3.1) :

$$\frac{u_{l+1} - u_l}{\delta t} = a_l \mathcal{H}_l + b_l \mathcal{H}_{l-1} + c_l \nabla^2 \left( \frac{u_{l+1} + u_l}{2} \right), \quad (5.3.4)$$

où  $\mathcal{H}$  regroupe les termes non-linéaires traités en explicite. Les constantes pour chaque pas du schéma numérique ( $l = 1, 2, 3$ ),

$$a_1 = \frac{8}{15}, a_2 = \frac{5}{12}, a_3 = \frac{3}{4}, b_1 = 0, b_2 = -\frac{17}{60}, b_3 = -\frac{5}{12}, c_1 = \frac{8}{15}, c_2 = \frac{2}{15}, c_3 = \frac{1}{3},$$

sont calculées analytiquement pour que le schéma semi-implicite soit précis à l'ordre deux en temps. De plus, le schéma permet des pas de temps  $\delta t$  raisonnablement grands pour l'intégration de l'équation pour des temps longs. La stabilité de la solution stationnaire obtenue (représentant des configurations d'équilibre) peut ainsi être vérifiée. L'équation semi-implicite est résolue par une technique de factorisation approchée (ADI), ce qui permet d'inverser que des systèmes à matrice tri-diagonale par une méthode directe (LU).

Pour la discrétisation spatiale, une méthode de différences finies est utilisée sur un maillage cartésien régulier. Afin de résoudre les gradients importants introduits par la présence des vortex dans le condensats, un schéma compact, précis à l'ordre 6 a été choisi.

---

Les schémas compacts font partie des schémas aux différences finies *implicites*. Une relation implicite permet de calculer simultanément (par l'inversion d'un système linéaire) les valeurs discrètes des dérivées en tous les points du maillage. Dans [Lele \(1992\)](#), plusieurs familles de schémas compacts sont dérivées. Les plus utilisés sont le schéma de type Padé, car l'ordre 6 est obtenu par l'inversion d'un système à matrice tri-diagonale seulement. Ces schémas s'écrivent pour la dérivée première

$$\frac{1}{3} u'_{i-1} + u'_i + \frac{1}{3} u'_{i+1} = \frac{14}{9} \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\delta x} + \frac{1}{9} \frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{4\delta x}, \quad (5.3.5)$$

et seconde :

$$\begin{aligned} \frac{2}{11} u''_{i-1} + u''_i + \frac{2}{11} u''_{i+1} = \\ \frac{12}{11} \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\delta x^2} + \frac{3}{11} \frac{u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}}{4\delta x^2}, \end{aligned} \quad (5.3.6)$$

avec  $\delta x$  le pas de la discrétisation. Ces schémas ont l'avantage d'avoir un comportement proche des schémas spectrales, sans introduire de diffusion numérique.

---



Le maillage est régulier dans les trois directions de l'espace, avec des densités de maillage déterminées par des tests de convergence pour chaque cas de calcul. Pour des vitesses de rotation  $\Omega$  importantes, quand le condensat devient presque sphérique et plus de 100 vortex sont présents, des maillages avec la résolution maximale de  $240 \times 240 \times 240$  ont dû être utilisés.

Regardons maintenant comment évolue le condensat en *temps imaginaire*. Une simulation typique utilise comme condition initiale un état sans vortex, décrit par la distribution de densité de Thomas-Fermi 5.3.2 pour un potentiel  $V_{trap}$  donné. En augmentant brusquement la vitesse de rotation  $\Omega$ , plusieurs vortex entrent dans le condensat par la l'instabilité de sa frontière. Le résultat est un état avec de vortex très distordus (figure 5.5) que j'ai appelé *réseau de vortex spaghetti*. Au fur et à mesure de l'avancement en temps imaginaire, l'énergie diminue et les vortex deviennent de plus en plus droits en s'arrangeant dans un réseau hexagonal (5.5). La convergence est atteinte quand la variation relative de l'énergie  $|\delta E/E|$  est inférieure à  $10^{-6}$ . Cette convergence est particulièrement lente pour des configurations avec plus de 100 vortex (le réseau, même ordonné, continue à évoluer lentement avec des changements mineurs dans la position des vortex).

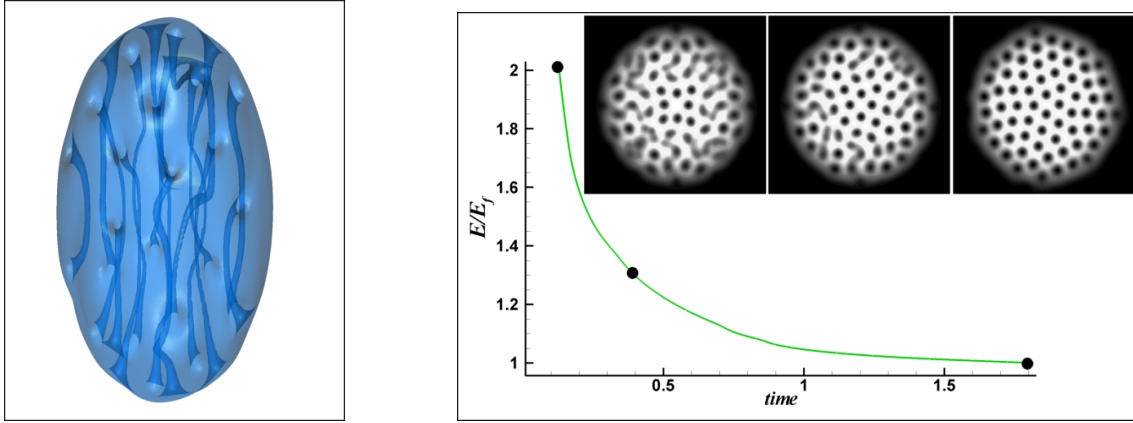


Figure 5.5.: Configuration de condensat avec un réseau de vortex de type *spaghetti*. Illustration de la convergence d'un calcul en temps imaginaire : variation de l'énergie du condensat (normalisée par sa valeur finale) et structure du réseau de vortex pour différentes valeurs de temps (comme dans les expériences, on représente le *contrast* calculé par l'intégration de la densité atomique suivant l'axe  $z$  du condensat.)

Remarquons que la méthode numérique présentée est adaptée à la propagation en temps imaginaire de l'équation de Gross-Pitaevskii (vue dans ce cas comme une équation de la chaleur en variables complexes). Cette méthode a la propriété de diminuer l'énergie du système, comme décrit dans Bao and Du (2004). Pour la propagation en *temps réel* de l'équation (avec le terme  $i\partial u/\partial t$ ), les méthodes numériques sont différentes (voir Bao and Du, 2006) et ne seront pas discutées ici.



## 5. *Simulations de tourbillons dans un condensat de Bose-Einstein*



# 6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

## Présentation générale

---

Je montre dans ce chapitre les résultats obtenus en utilisant la méthode numérique décrite précédemment. Les configurations simulées correspondent généralement aux expériences effectuées au Laboratoire Kastler-Brossel, dans le groupe de [Jean Dalibard](#). D'autres configurations ont été proposées aux expérimentateurs, à partir de l'analyse théorique des résultats.

Une grande variété de formes de vortex sera présentée. L'analyse de la structure 3D des vortex a concentré notre attention, car cette information n'est pas toujours disponible dans les expériences. Un grand effort a été fourni pour développer des diagnostics proches de ceux utilisés par les expérimentateurs pour le post-traitement des données numériques. L'accord, non seulement qualitatif, mais aussi quantitatif avec les expériences et la théorie, a été recherché.

L'objectif de ces études étant d'apporter un complément d'information par rapport à l'expérience, les résultats ont été publiés dans des revues de physique. Les simulations ont été utilisées également pour la validation des théories mathématiques proposées dans le contexte des condensats de Bose-Einstein ([Aftalion, 2006](#)).

Le *catalogue* des structures tourbillonnaires est organisé suivant le type de vortex observé. Il dépend de la forme du potentiel de piégeage et de la vitesse de rotation du condensat. Je rappelle que les lignes de vortex sont identifiées numériquement par des iso-surfaces de faible densité atomique ( $\rho = |\psi|^2$ ), proche du zéro numérique. Plusieurs types de configurations seront analysées :

- condensat avec une seule ligne de vortex, qui peut prendre la forme en  $U$ , en  $S$  (plan) ou en  $S$  (tridimensionnel) ; c'est le cas du potentiel de piégeage harmonique, le plus étudié expérimentalement et théoriquement ([Aftalion and Danaila, 2003](#)) ;
- condensat avec un vortex géant obtenu pour de faibles vitesses de rotation, avec un potentiel de type *quartique-moins-harmonique* ; cette configuration n'a pas été étudiée expérimentalement ([Aftalion and Danaila, 2004](#)) ;



## 6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

- réseau de vortex et vortex géant dans un condensat à rotation rapide, piégé dans un potentiel de type *quartique-plus-harmonique*; dans ce cas, les simulations utilisant exactement les paramètres de l'expérience ont réussi à compléter l'information fournie par l'expérience ([Danaila, 2005](#));
- condensat sans rotation, avec des structures de vortex *exotiques* que nous avons imaginées théoriquement et dont la création serait possible par les nouvelles techniques expérimentales d'impression de phase ([Crasovan et al., 2004](#)).

Une nouvelle configuration, actuellement en cours d'étude, concerne les condensats en rotation dans des pièges optiques et elle sera présentée dans le chapitre suivant contenant les travaux en cours et les perspectives dans ce domaine de recherche.

**Mots clés :** condensat de Bose-Einstein, tourbillon quantique, vortex géant, réseau de vortex.

**Points forts :** Simulation 3D d'une configuration expérimentale en rotation rapide, contenant plus de 100 vortex – observation de l'apparition du vortex géant.

**Publications :** articles : [A3], [A6, A7, A9, A10],  
codes calcul : [Code1].

**Collaborations :** A. Aftalion (CNRS, Lab. Jacques-Louis Lions),  
L. C. Crasovan (Universitat Politecnica de Catalunya, Barcelona),  
J. Dalibard, S. Stock, V. Bretin (Lab. Kastler Brossel, ENS),  
Q. Du (Penn State University, USA),  
V. M. Pérez-García (University of Castilla–La Mancha).

---



## 6.1. Vortex unique dans un condensat en rotation

Le piège magnétique le plus souvent utilisé pour confiner le condensat de Bose-Einstein est décrit par le potentiel de type harmonique (5.2.2). Ce type de potentiel a été utilisé pour étudier expérimentalement des configurations de condensat avec une seule ligne de vortex à l'intérieur (Madison et al., 2001; Rosenbusch et al., 2002; Bretin, 2004). Les expériences ont montré que la ligne de vortex dans un condensat en forme de cigare n'est pas droite, mais courbée (vortex en  $U$ ) – les vortex en  $S$  ont été aussi observés (figure 6.1).

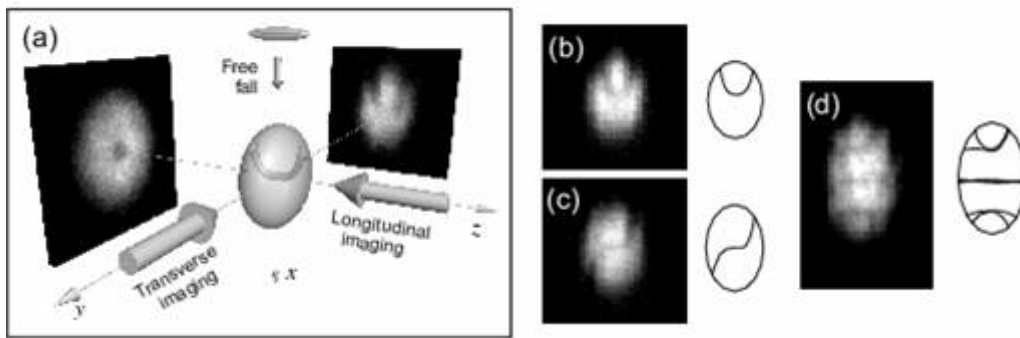


Figure 6.1.: Configurations expérimentales de condensat avec vortex obtenues expérimentalement (Rosenbusch et al., 2002).

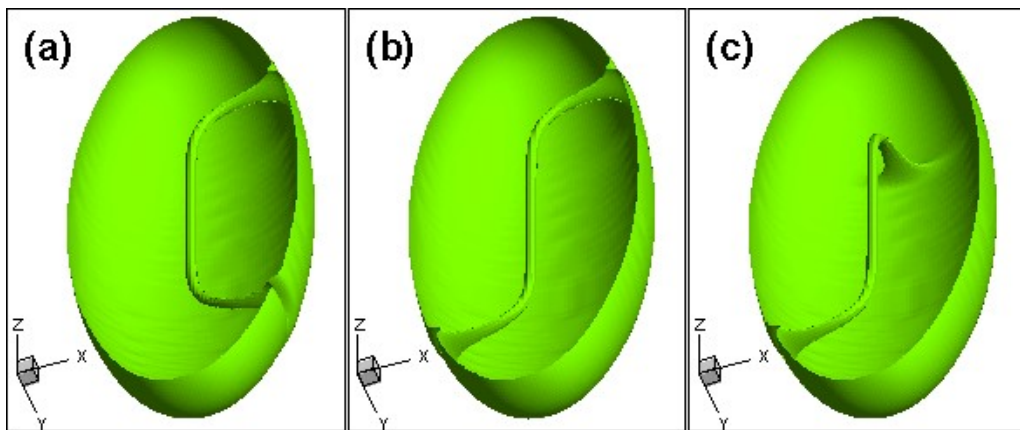


Figure 6.2.: Configurations obtenues numériquement avec un seul vortex dans le condensat : (a) vortex en  $U$ , (b) vortex en  $S$  plan, (c) vortex en  $S$  tridimensionnel.



## 6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

Les paramètres numériques sont fixés pour reproduire les expériences réalisées au LKB. Le potentiel (5.2.2) devient dans sa forme sans dimension :

$$V = x^2 + \alpha^2 y^2 + \beta^2 z^2, \quad (6.1.1)$$

avec  $\alpha = 1.06$ ,  $\beta = 0.067$ , correspondant aux valeurs physiques :

$$m = 1.445 \cdot 10^{-25} [kg], \quad a_s = 5.8 \cdot 10^{-9} [m], \quad N = 1.4 \cdot 10^5, \quad \omega_x = 1094 [s^{-1}].$$

Le paramètre  $\varepsilon$  prend la valeur 0.02. La vitesse angulaire  $\tilde{\Omega}$  est le paramètre d'étude. Les simulations numériques trouvent les états stables pour une valeur fixée de  $\tilde{\Omega} \in [0, 0.9]$ , à partir des conditions initiales différentes. Un modèle simple pour la description d'un tourbillon 3D a été utilisé pour générer des conditions initiales avec des vortex dans le condensat.

---

Par exemple, un condensat qui présente initialement un vortex droit centré, de rayon  $\varepsilon$  est décrit par l'ansatz :

$$u(x, y, z) = \sqrt{\rho_{TF}} \cdot u_\varepsilon, \quad (6.1.2)$$

$$u_\varepsilon = \sqrt{0.5 \left\{ 1 + \tanh \left[ \frac{4}{\varepsilon} (r - \varepsilon) \right] \right\}} \cdot \exp(i\varphi),$$

avec  $(r, \varphi)$  les coordonnées polaires dans le plan  $(x, y)$ . La forme 3D du vortex peut être facilement modifiée en déplaçant le centre du vortex dans des plans  $(x, y)$  successifs. Pour obtenir un vortex en  $S$ , par exemple, on peut utiliser la fonction :

$$r_0(z) = \begin{cases} -1 + \tanh \left[ \alpha_v \left( 1 + \frac{z}{\beta_v} \right) \right] / \tanh(\alpha_v), & z < 0 \\ 1 + \tanh \left[ \alpha_v \left( -1 + \frac{z}{\beta_v} \right) \right] / \tanh(\alpha_v), & z \geq 0, \end{cases}$$

avec les constantes  $\alpha_v, \beta_v$  qui contrôlent, respectivement, la courbure et la longueur du vortex.

---

Les simulations reproduisent remarquablement bien (figure 6.2) les configurations observées expérimentalement. Le vortex en  $U$  est obtenu, soit en partant d'une condition initiale sans vortex et en augmentant brusquement la vitesse de rotation, soit par continuité, en utilisant la solution avec le même type de vortex, mais pour une vitesse de rotation inférieure. Le vortex a une structure plane, avec une partie centrale sur l'axe  $z$  et deux branches, situées dans le même plan, qui rejoignent la frontière du condensat perpendiculairement. Ce type de vortex est stable pour des vitesses de rotation dépassant le seuil critique  $\tilde{\Omega}_c = 0.42$ . L'asymétrie du piège



( $\alpha \neq 1$ ) fait que les seules configurations stables ont les branches dans le plan  $(x - z)$  ou  $(y - z)$ . Ces caractéristiques confirment aussi les prédictions de l'analyse mathématique (Aftalion and Riviere, 2001; Aftalion, 2006) basées sur l'étude de la fonctionnelle approchant l'énergie de Gross-Pitaevskii d'une ligne de vortex.

Le vortex en  $S$ , visible sur la figure 6.1, a été obtenu numériquement en partant d'une condition initiale contenant un ansatz pour ce type de vortex. Nous avons vérifié que, pour une valeur de  $\tilde{\Omega}$  fixée, la forme du vortex en  $S$  final est indépendante des paramètres de l'ansatz initial. Cette configuration a été trouvée (voir figure 6.2b) pour toute la gamme de vitesse de rotation ( $\tilde{\Omega} > 0$ ); il s'agit d'un état méta-stable qui est seulement un minimum local de la fonctionnelle énergie. Une animation du vortex en  $S$ -plan est présentée sur la figure 6.3.

Nous avons également obtenu le vortex en  $S$  tridimensionnel (voir figure 6.2c), avec les deux branches situés dans des plans différents. Les deux configurations se superposent en appliquant une rotation des deux branches courbes. Les branches du vortex en  $S$  peuvent être situées seulement dans les plans  $(x - z)$  ou  $(y - z)$ . Pour la même fréquence de rotation l'énergie du vortex en  $S$  est légèrement supérieure à celui du vortex en  $U$ .

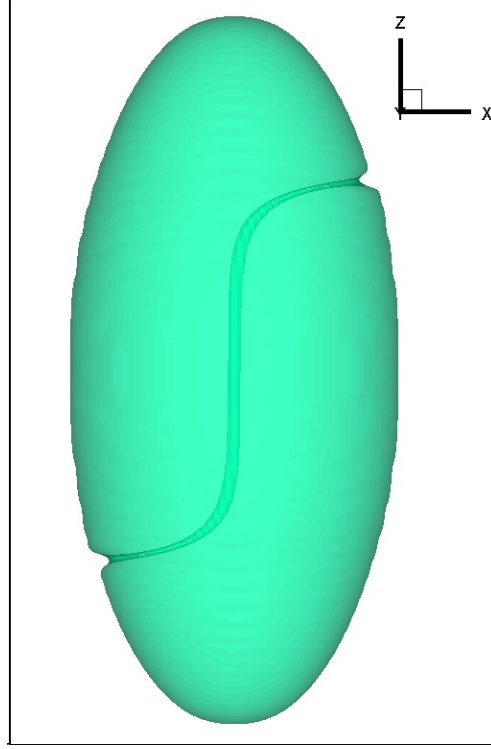


Figure 6.3.: (Animation) Ligne de vortex en  $S$  dans un condensat de Bose-Einstein en rotation.

En augmentant la vitesse de rotation nous avons également obtenu des configurations avec 2, 3 et 4 vortex dans le condensat; ces configurations sont décrites dans Aftalion and Danaila (2003).



## 6.2. Vortex géant dans un condensat en rotation

### 6.2.1. Étude théorique

Le potentiel harmonique ne permet pas d'atteindre de grandes vitesses de rotation, car dans la limite  $\tilde{\Omega} \rightarrow 1$  la force centrifuge devient égale à la force de confinement et la cohérence du condensat est perdue. Le moyen expérimental (Bretin et al., 2004; Stock et al., 2005; Bretin, 2004) trouvé pour contourner cette limitation a été de mettre en place un piège hybride par l'ajout d'un faisceau laser le long de l'axe  $z$ . Le potentiel de piégeage (5.2.2) devient, avec la notation ( $r^2 = x^2 + y^2$ ) :

$$V_{trap}(r, z) = \frac{1}{2}m(\omega_{\perp}^{(0)})^2 r^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2 + U_0 e^{-2r^2/w^2}, \quad (6.2.1)$$

avec les valeurs des paramètres :

$$\omega_{\perp}^{(0)} = 2\pi \cdot 75.5 [Hz], \quad \omega_z = 2\pi \cdot 11 [Hz], \quad w = 25 [\mu m], \quad U_0 = k_B \cdot 90 [nK],$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann. Après développement en série de l'exponentielle pour  $r/w$  petit, ce potentiel peut s'écrire sous la forme adimensionnelle :

$$V = (1 - \alpha)r^2 + \frac{1}{4}kr^4 + \beta^2 z^2. \quad (6.2.2)$$

Quand le condensat est mis en rotation, la force centrifuge fait que le potentiel effectif de piégeage soit diminué :

$$V_{eff} = (1 - \alpha)r^2 - \varepsilon^2 \tilde{\Omega}^2 r^2 + \frac{1}{4}kr^4 + \beta^2 z^2. \quad (6.2.3)$$

Dans Aftalion and Danaila (2004) nous avons analysé théoriquement le comportement du condensat piégé par le potentiel (6.2.2). Trois régimes ont été mis en évidence (voir aussi la figure 6.4), en regardant la distribution de densité de Thomas-Fermi du condensat au repos ( $\tilde{\Omega} = 0$ ) :

- (1) (régime faiblement attractif) obtenu pour  $\alpha < 1$  ; c'est le régime le plus proche des expériences. Sans rotation, le condensat classique (en forme de cigare) est obtenu (figure 6.4-1).
- (2) (régime répulsif intermédiaire) pour  $1 < \alpha < 1 + \xi$ , avec  $\xi = \beta^{1/4} k^{5/8} / \sqrt{\pi}$ . Pour  $\tilde{\Omega} = 0$ , le condensat présente une forme de *chapeau mexicain* à ses extrémités (figure 6.4-2).
- (3) (régime répulsif fort) pour  $\alpha > 1 + \xi$  ; le condensat présente un trou au milieu, même à  $\tilde{\Omega} = 0$ .



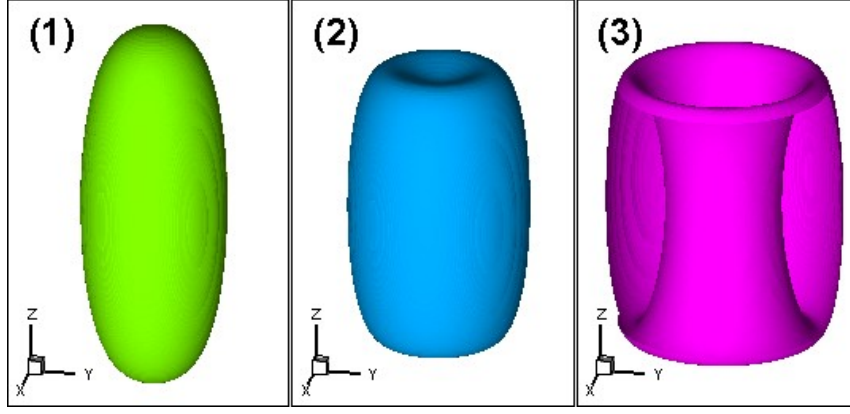


Figure 6.4.: Condition initiale pour la simulation numérique. Forme du condensat sans rotation, correspondant au profil de densité de Thomas-Fermi avec le potentiel de piégeage (6.2.2). Les trois régimes sont décrits dans le texte.

Les expériences correspondent au régime (1). En augmentant la vitesse de rotation, le potentiel effectif (6.2.3) fait que le condensat développe la forme en *chapeau mexicain*. En même temps, des vortex sont nucléés et un réseau de vortex de type Abrikosov est obtenu. En augmentant encore  $\tilde{\Omega}$ , la théorie prédit l'apparition d'un trou autour duquel la phase présente plusieurs discontinuités, d'où le nom de vortex géant. Cette configuration n'a pas été observée expérimentalement à cause de l'instabilité de la configuration expérimentale pour de très grandes vitesses de rotation.

Dans Aftalion and Danaila (2004) nous avons suggéré l'utilisation d'un potentiel de piégeage du type *quartique-moins-harmonique*, correspondant au régimes (2) ou (3). Ce type de potentiel pourrait être réalisé en augmentant l'amplitude  $U$  du rayon laser additionnel (voir l'équation 6.2.1). J'ai prouvé numériquement que dans ce cas, le vortex géant est obtenu pour des rotations plus faibles. Les animations 6.5 montrent le processus d'apparition du vortex géant avec l'augmentation de la vitesse de rotation. En partant d'une condition initiale avec un profil de densité en *chapeau mexicain*, le condensat développe des vortex à l'intérieur qui finalement fusionnent au centre pour former le vortex géant. Chaque image (animation) montre la structure d'équilibre du condensat pour un  $\tilde{\Omega}$  donné. La fusion des vortex est un processus tridimensionnel qui ne peut pas être observé expérimentalement. Les lignes de vortex simples commencent à fusionner par leur partie centrale ; le phénomène se propage le long de l'axe  $z$  pour donner naissance au trou. Il est intéressant d'observer que la fusion n'implique pas tous les vortex simples et une couronne de tels vortex continue à exister autour du trou. Plusieurs études théoriques postérieures (voir, par exemple Kim and Fetter, 2005) ont confirmé ces observations.



## 6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

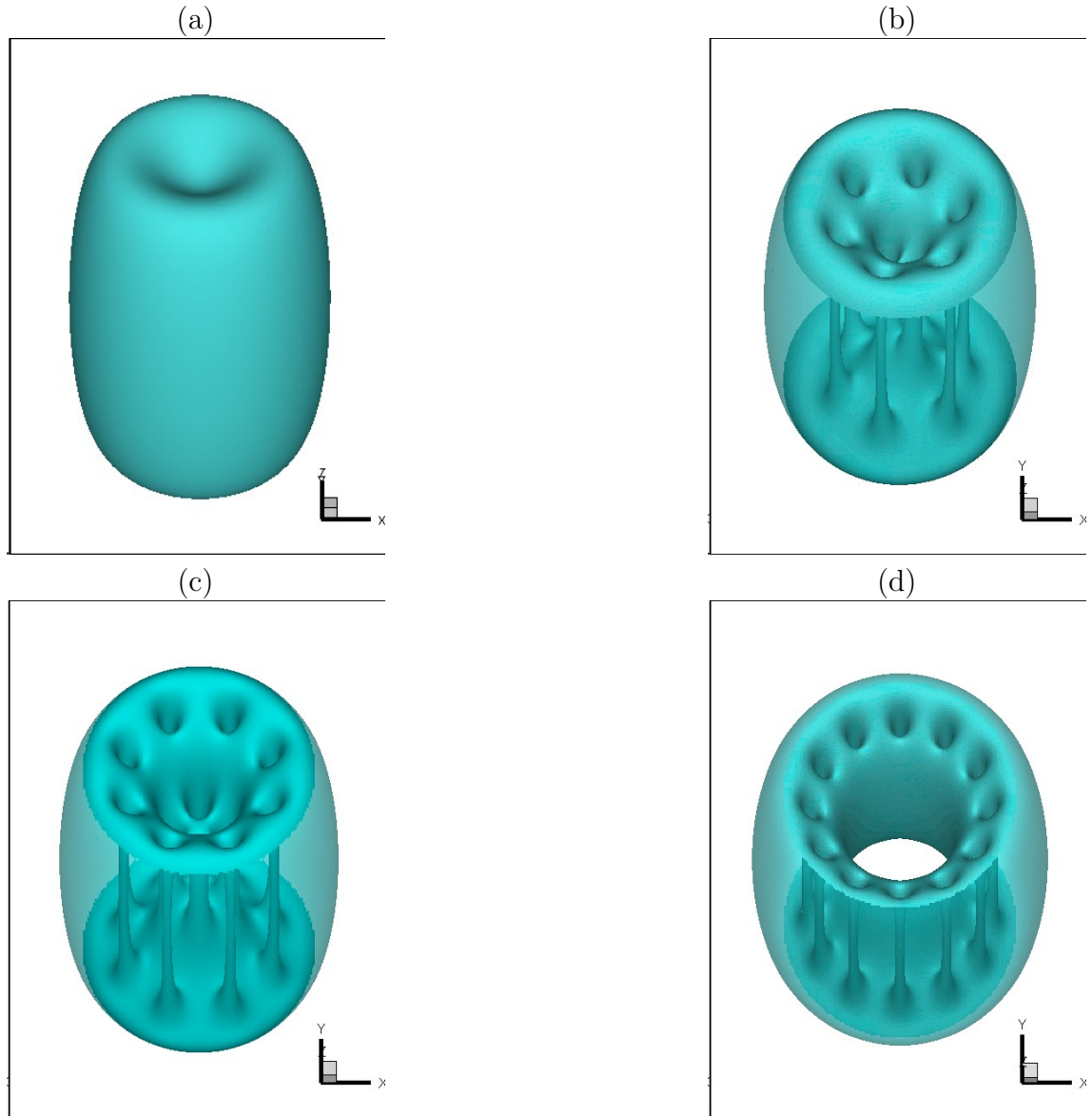


Figure 6.5.: (Animations) Naissance d'un vortex géant dans un condensat en rotation piégé par un potentiel *quadratique-moins-harmonique*. Chaque image (animation) montre la structure d'équilibre (simulation convergée) du condensat pour une vitesse de rotation  $\tilde{\Omega}$  donné. Valeurs croissantes de  $\tilde{\Omega}$  suivant la séquence a-b-c-d.

### 6.2.2. Comparaison avec les expériences

Suite à une discussion avec [Jean Dalibard](#) et [Sabine Stock](#), je me suis lancé le défi de réaliser une simulation avec exactement les paramètres de l'expérience réalisée au LKB ([Bretin et al., 2004](#); [Stock et al., 2005](#)). Cette configuration comporte un réseau



de plusieurs dizaines de vortex, voir même une centaine pour de très grandes vitesses de rotation. D'un point de vue numérique, de maillages très fins sont nécessaires pour avoir une bonne résolution spatiale et des temps d'intégration très longs, car plus le réseau de vortex est dense, plus la convergence est lente. Le code BETI a été ré-optimisé pour permettre des calculs avec des maillages de l'ordre de  $240^3$  ( $\sim 14$  millions de points). Au prix d'environ une semaine d'attente pour un calcul, j'ai réussi à obtenir des configurations numériques correspondant aux expériences.

Les résultats [Danaila \(2005\)](#) sont en très bon accord avec l'expérience pour la gamme de fréquences de rotation permettant des observations expérimentales claires (voir figure 6.6).

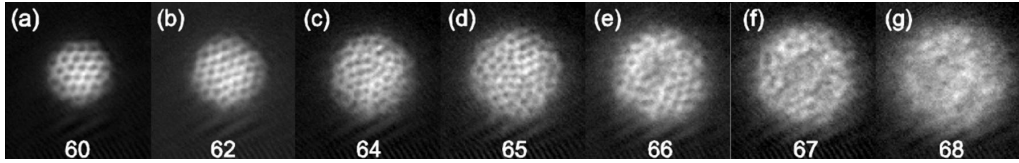


Figure 6.6.: Visualisation expérimentale du condensat en rotation rapide ([Bretin et al., 2004](#)).

Les dimensions du condensat et le nombre de vortex sont similaires. La simulation numérique (figure 6.7) permet d'aller plus loin dans l'exploration de la gamme de vitesses de rotation élevées. On observe notamment l'apparition du vortex géant au milieu d'un réseau de vortex très dense. Cette caractéristique, prédite par les théories physiques, n'était pas clairement mise en évidence expérimentalement.

J'ai également voulu extraire des informations quantitatives à partir des simulations. J'ai développé des programmes Matlab qui arrivent à extraire (plus au moins) automatiquement les informations sur le paramètre  $b_v$  du réseau hexagonal de vortex et la dimension du coeur de chaque vortex, à partir d'une image de contraste (voir la dernière ligne d'images sur la figure 6.7). Ces programmes pourraient s'appliquer aussi aux images obtenues expérimentalement.

Les données quantitatives ainsi obtenues décrivent l'inhomogénéité du réseau de vortex. Les résultats (figure 6.8) sont en très bon accord avec les théories existantes ([Sheehy and Radzihovsky, 2004](#)).



## 6. Structure 3D des tourbillons quantiques dans un condensat de Bose-Einstein

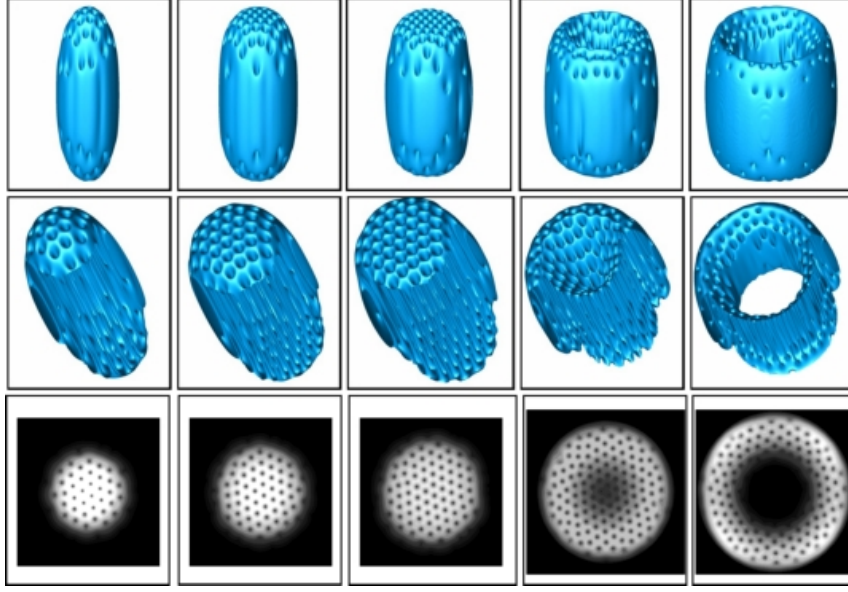


Figure 6.7.: Simulation du condensat en rotation rapide en utilisant les paramètres de l'expérience de [Bretin et al. \(2004\)](#). Configurations d'équilibre pour différentes valeurs de la vitesse de rotation - de haut en bas :  $\Omega/2\pi = 60, 64, 66, 70.6, 73$  (respectivement,  $\Omega/\omega_{\perp} = 0.92, 0.98, 1.01, 1.08, 1.11$ ). Iso-surfaces de faible densité atomique et densité intégrée suivant la direction  $z$  (image 2D).

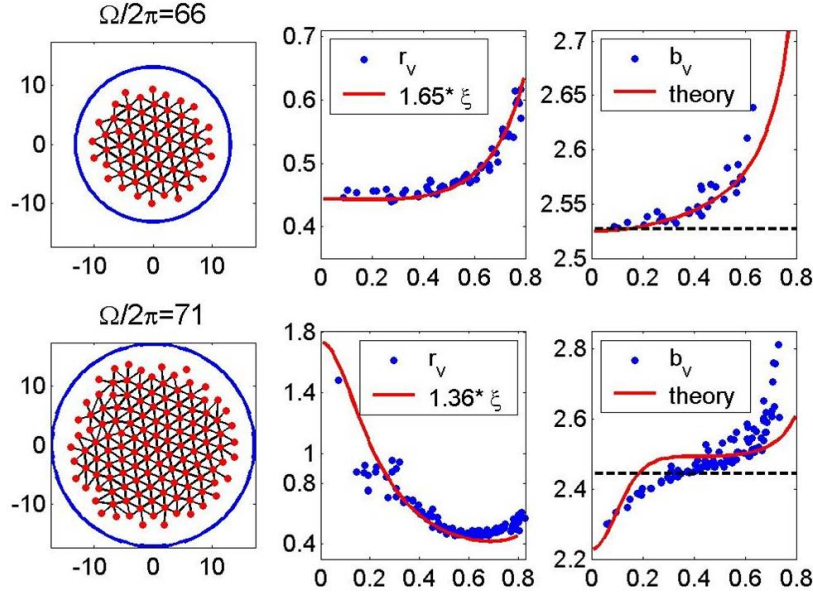


Figure 6.8.: Données quantitatives extraites de la simulation (symboles) : paramètre  $b_v$  du réseau hexagonal de vortex et rayon  $r_v$  du coeur du vortex. Comparaison avec les prédictions théoriques de [Sheehy and Radzihovsky \(2004\)](#) (en trait continu).



## 6.3. Vortex exotique dans un condensat sans rotation

La nouvelle technique expérimentale de *phase-engineering* développée au MIT (Leanhardt et al., 2002) permet de manipuler la phase de la fonction d'onde décrivant le condensat. Elle semble très prometteuse pour la manipulation de cet objet quantique cohérent. Dans l'hypothèse de l'utilisation de cette technique, nous avons imaginé dans Crasovan et al. (2004) quelques configurations *exotiques* de vortex qui pourraient être obtenues dans un condensat sans rotation.

On montre que la structure spatiale de la fonction d'onde du condensat sans interactions peut se mettre sous la forme :

$$\psi(x, y, z) = \phi(x, y, z) e^{-\sum_{k=x,y,z} \lambda_k x_k^2/2}, \quad (6.3.1)$$

où  $\phi$  a une forme polynômiale, résultant d'une combinaison de polynômes de Hermite. Nous obtenons toute une variété de structures spatiales de vortex :

- vortex étoile (figure 6.9a) décrit par

$$\begin{aligned} \phi_{\text{star}} &= H_2(x)H_0(y)H_0(z) - H_0(x)H_2(y)H_0(z) \\ &+ i(H_2(x)H_0(y)H_0(z) - H_0(x)H_0(y)H_2(z)) \\ &= 4[(x^2 - y^2) + i(x^2 - z^2)]. \end{aligned} \quad (6.3.2)$$

- anneaux de vortex parallèles (figure 6.9b)

$$\begin{aligned} \phi_{\parallel} &= H_2(x)H_0(y)H_0(z) + H_0(x)H_2(y)H_0(z) \\ &+ H_0(x)H_0(y)H_2(z) + iH_0(x)H_0(y)H_2(z) \\ &= [(4x^2 + 4y^2 + 4z^2 - 6) + i(4z^2 - 2)] \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

- anneaux de vortex perpendiculaires (figure 6.9c)

$$\begin{aligned} \phi_{\perp} &= H_2(x)H_0(y)H_0(z) + H_0(x)H_2(y)H_0(z) \\ &+ H_0(x)H_0(y)H_2(z) + iH_1(x)H_1(y)H_0(z) \\ &= [(4x^2 + 4y^2 + 4z^2 - 6) + 4ixy], \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

- lignes de vortex anti-parallèles (figure 6.9d)

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= H_2(x)H_0(\sqrt{2}y) + iH_0(x)H_1(\sqrt{2}y) \\ &= 4x^2 - 2 + 2i\sqrt{2}y \end{aligned} \quad (6.3.5)$$

- $n$  anneaux de vortex stationnaires (figure 6.9e, pour  $n = 1$ )

$$\begin{aligned} \phi(x, y, z) &= H_0\left(\sqrt{2/n} z\right) [H_2(x)H_0(y) + H_0(x)H_2(y)] \\ &+ iH_0(x)H_0(y)H_n\left(\sqrt{2/n} z\right) \\ &= 4(x^2 + y^2 - 1) + iH_n\left(\sqrt{2/n} z\right). \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

Dans les cas (a, b, c) on a imposé  $\lambda_x = \lambda_y = \lambda_z = 1$  et dans les cas (d, e)  $\lambda_x = \lambda_z = 1$ ,  $\lambda_y = 2$ . Ces états méta-stables ont montré une grande stabilité dans les simulations numériques utilisant le code BETI pour la propagation en temps imaginaire.



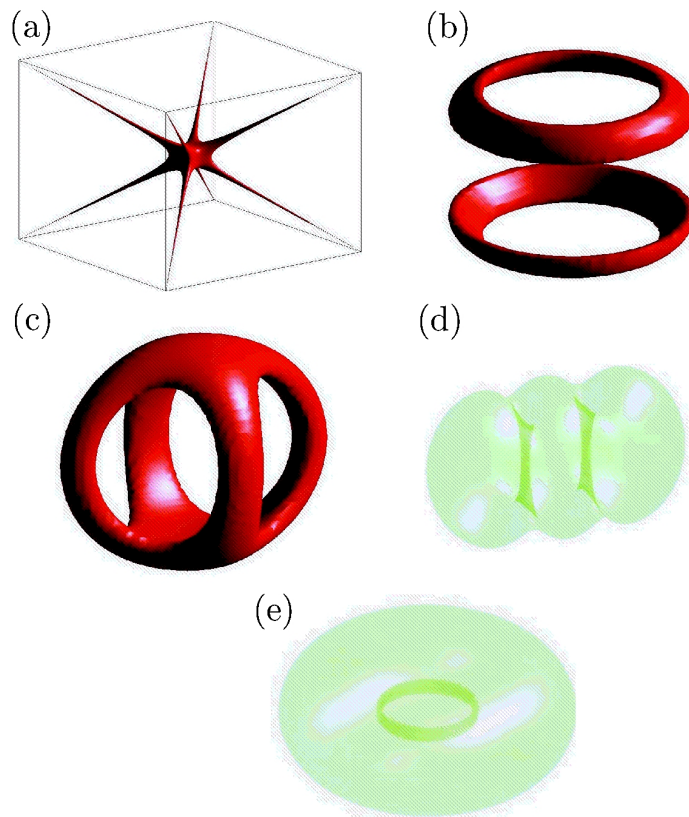


Figure 6.9.: Vortex exotiques obtenus théoriquement par impression de phase dans un condensat sans rotation (Crasovan et al., 2004).



## 7. Travaux en cours et perspectives

Les travaux en cours et les perspectives dans le domaine de l'analyse du système superfluide du condensat de Bose-Einstein s'organisent suivant deux axes majeurs :

- Étude mathématique et numérique du condensat placé dans un piège optique.
- Développement numérique du code de simulation BETI.

### 7.1. Étude mathématique et numérique du condensat placé dans un piège optique

Certaines expériences actuelles réalisées au LKB consistent à placer le condensat en forme de cigare dans un piège optique. Le résultat est la modification du potentiel de piégeage qui est modélisé par :

$$V(r, z) = V_h(r, z) + U_s \sin^2(\pi z/d),$$

où  $V_h(r, z)$  est le potentiel harmonique *classique* (voir l'équation 5.2.2). Pour des amplitudes  $U_s$  importantes, le condensat initial est divisé en plusieurs tranches (ou sites) horizontales, dont le nombre dépend de la valeur du paramètre  $d$ . Dans l'expérience, 30 à 32 sites sont théoriquement obtenus, mais ils sont difficilement observables sur la figure 7.1.

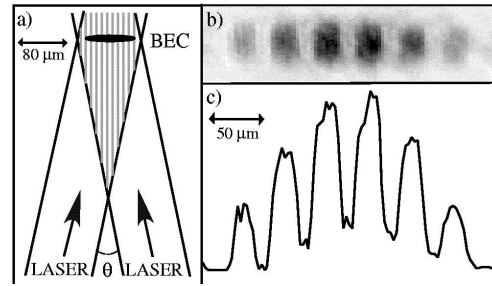


Figure 7.1.: Condensat sans rotation placé dans un piège optique. Visualisation expérimentale (Hadzibabic et al., 2004).

La simulation numérique pourrait apporter des informations très utiles pour l'étude de cette configuration 3D. Mes premiers calculs exploratoires ont considéré la même configuration, mais avec le condensat en rotation. Une grande richesse de réseaux de vortex est observée numériquement (figure 7.2).

L'analyse de ces configurations, impliquant de nouveaux phénomènes physiques, est



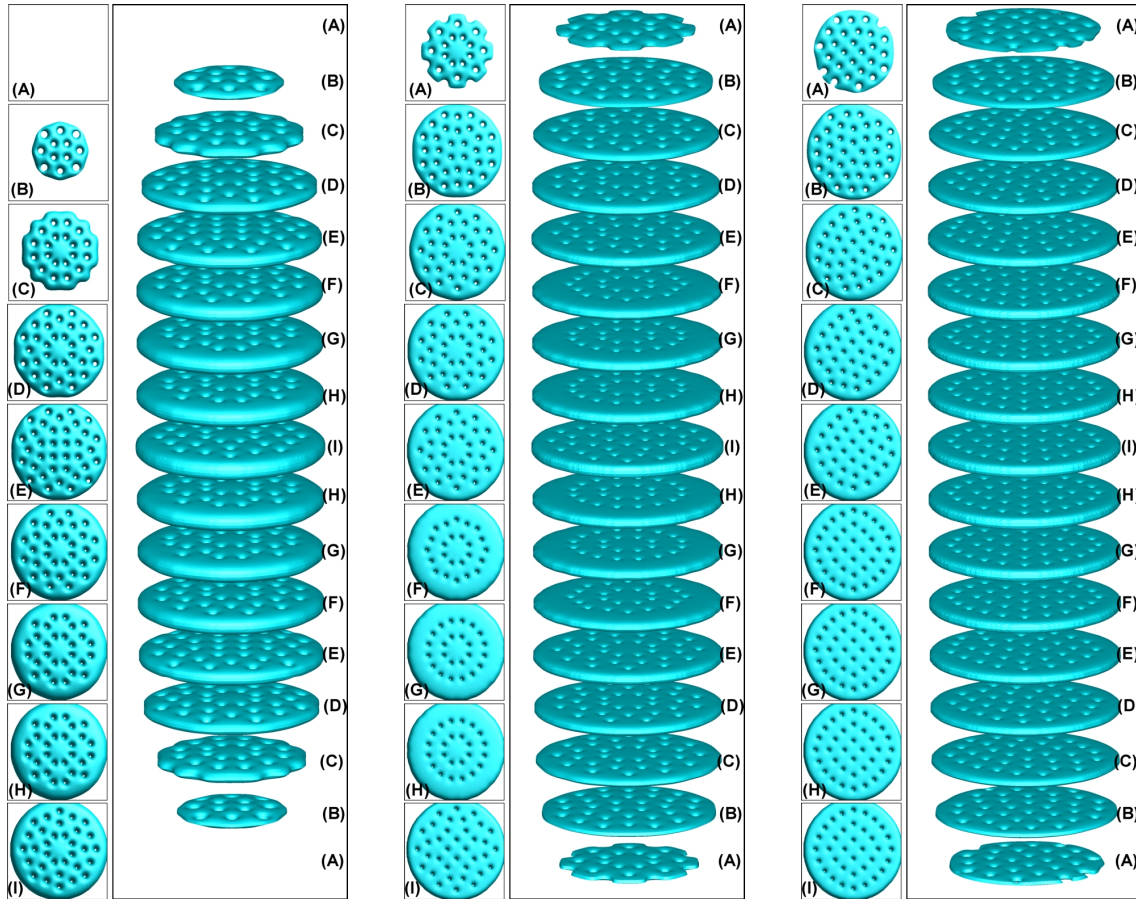


Figure 7.2.: Condensat en rotation, placé dans un piège optique. La vitesse de rotation est la même et l'amplitude  $U_s$  du piège optique croît de gauche à droite.

en cours. Il faut préciser qu'il s'agit d'une configuration complètement nouvelle, pour laquelle les données expérimentales n'existent pas pour l'instant.

Sur le plan mathématique, il faudra notamment comprendre comment la minimisation de l'énergie conduit à ces types de configurations, en fonction du régime de rotation appliqué. Un premier cas simple à étudier est celui de deux *tranches* de condensat, pour comprendre comment les vortex sont couplés entre les tranches. Cette étude théorique bénéficiera des compétences de [Sylvia Serfaty](#) (Professeur associé à l'UPMC) avec laquelle nous co-encadrerons, à partir d'octobre 2008, le stage post-doctoral de [Parimah Kazemi](#) (docteur de l'Université de North Texas).



## 7.2. Développement numérique du code de simulation BETI

La simulation des configurations présentées sur la figure 7.2 demande une grande résolution spatiale et des temps de calculs importants. J'envisage d'optimiser encore le code et surtout le rendre parallèle pour réduire le temps de calcul. La parallélisation ne sera pas un tâche facile à cause de l'utilisation des outils numériques semi-implicites (schéma compacts, schéma de Crank-Nicolson).

Une version du code en coordonnées cylindriques est actuellement à l'étude, ainsi que l'extension du code pour simuler l'évolution en *temps réel* des systèmes superfluides. La structure du code sera gardée, en particulier la discrétisation par des schéma compacts qui ont prouvé leur efficacité; en échange une nouvelle méthode d'intégration en temps sera adoptée suivant les travaux de Bao and Du (2006).



## *7. Travaux en cours et perspectives*



# III

## Bibliographie







## Bibliographie du chapitre 1

- I. Danaila.** *Etude des instabilités et des structures cohérentes dans la zone de proche sortie d'un jet axisymétrique.* PhD thesis, Université d'Aix-Marseille II, 1997.
- I. Danaila and B. J. Boersma.** Mode interaction in a forced homogeneous jet at low Reynolds numbers. In *Proceedings of the Summer Program*, page 141. Center for Turbulence Research, Stanford Univ., 1998.
- I. Danaila and B. J. Boersma.** Direct numerical simulation of bifurcating jets. *Physics of Fluids*, 12 :1255–1257, 2000.
- I. Danaila, J. Dusek and F. Anselmet.** Space Structure of the Free, Unsteady, Round, Homogeneous Jet at Low Reynolds Numbers. In L. Machiels S. Gavrilakis and P. A. Monkewitz, editors, *Advances in Turbulence VI*, pages 11–14. Kluwer Academic Publishers, 1996a.
- I. Danaila, J. Dusek and F. Anselmet.** Coherent structures in a round, spatially evolving, unforced, homogeneous jet at low Reynolds numbers. *Physics of Fluids*, 9 :3323–3342, 1997a.
- I. Danaila, J. Dusek and F. Anselmet.** Direct numerical simulations of the free, unsteady, round, unforced jet at low Reynolds numbers. In P. R. Voke J.-P. Cholle and L. Kleiser, editors, *Direct and Large-Eddy Simulation II*, pages 1–10. Kluwer Academic Publishers, 1997b.
- I. Danaila, J. Dusek and F. Anselmet.** Coherent structures in a round, spatially evolving, unforced, homogeneous jet at low Reynolds numbers. *Physical Review E*, 57 :3695–3698, 1998a.
- I. Danaila, J. Dusek and F. Anselmet.** Nonlinear dynamics of Low Reynolds Number Round Jets : Periodic Attractors and Transition to Chaos. In U. Frisch, editor, *Advances in Turbulence VII*, pages 105–108. Kluwer Academic Publishers, 1998b.
- G. Carte, J. Dušek and Ph. Fraunié.** A spectral time discretization for flows with dominant periodicity. *J. Comput. Physics*, 120 :171, 1995.
- P. Durbin and B. Pettersson Reif.** *Statistical Theory and Modeling of Turbulent Flows.* John Wiley & Sons, Chichester, New York, 2000.



## Bibliographie du chapitre 2

- J. Dusek, P. Fraunié, C. Dauchy and I. Danaila.** Secondary instabilities and transition to turbulence in wakes and jets. In S. Gavrilakis M. Deville and I. L. Ryming, editors, *Computation of Three-Dimensional Complex Flows*, pages 78–87. Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1996b.
- J. Dušek, P. Le Gal and Ph. Fraunié.** A numerical and theoretical study of the first Hopf bifurcation in a cylinder wake. *J. Fluid Mech.*, 264 :59, 1994.
- R. D. Henderson and G. EM Karniadakis.** Unstructured spectral element methods for simulation of turbulent flows. *J. Comput. Physics*, 122 :191, 1995.
- A. Hilgers and B. J. Boersma.** Optimization of turbulent jet mixing. *Fluid Dyn. Res.*, 29 :345, 2001.
- G. M. Homsy.** *Multimedia Fluid Mechanics, 2nd edition*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, 2008.
- M. Lee and W. C. Reynolds.** *Bifurcating and blooming jets*. Rep. tf-22, Dep. Mech. Eng. Thermosci. Div., Stanford Univ., 1985.
- G. P. Neitzel, C. S. Kirkconnell and L. J. Little.** Transient, nonaxisymmetric modes in the instability of unsteady circular Couette flow. Laboratory and numerical experiments. *Phys. Fluids*, 7 :324, 1995.
- D. Parekh, A. Leonard and W. C. Reynolds.** *Bifurcating jets at high Reynolds numbers*. Rep. tf-35, Dep. Mech. Eng. Thermosci. Div., Stanford Univ., 1988.
- A. T. Patera.** A spectral element method for Fluid Dynamics : laminar flow in a channel expansion. *J. Comput. Physics*, 54 :468, 1984.
- W. C. Reynolds, D. E. Parekh, P. J. D. Juvet and M. J. D. Lee.** Bifurcating and blooming jets. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 35 :295, 2003.
- H. Suzuki, N. Kasagi and Y. Suzuki.** On the formation of vortex rings and pairs. *Experiments in Fluids*, 36 :498, 2004.
- M. Van Dyke.** *Perturbation method in fluid mechanics*. Stanford : The Parabolic Press, Stanford, California, 1975.

## Bibliographie du chapitre 2

- C. M. Albane.** Embedded meshes of controllable quality synthesised from elementary geometric features. *AIAA Paper*, 92 :0662, 1992.



- P. Angot, C.-H. Bruneau and P. Fabrie.** A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81 : 497, 1999.
- M. Ballestra.** *Etude numérique de la formation et de la dissipation des tourbillons créés par un jet conique monophasique.* Rapport de stage de dess de mathématiques appliquées, Paris 6 et Institut Français du Pétrole, 2002.
- I. Danaila.** *Numerical implementation of the body-force method in the NTMIX Code.* Rapport interne, Institut Français du Pétrole, 2001.
- I. Danaila.** Vortex dipoles impinging on finite aspect ratio rectangular obstacles. *Flow, Turbulence and Combustion*, 72 :391, 2004.
- I. Danaila and T. Baritaud.** *Large Eddy Simulations for Stratified Charge Engines. LES Engines Program. Twelve-months periodic report.* Rapport interne, Institut Français du Pétrole, 1999.
- I. Danaila and S. Benteboula.** *Etude numérique et théorique des structures tourbillonnaires dans une injection gaz-gaz. Simulations numériques directes avec les codes JETLES et AVBP.* Rapport de contrat, Paris 6 et Institut Français du Pétrole, 2004.
- O. El Ganaoui, C. Habchi, G. Bruneaux and I. Danaila.** Numerical simulation of an experimental gas-gas jet generated by single-hole diesel-like injection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 47 :1011–1018, 2005.
- H. Lamb.** *Hydrodynamics.* Dover, New York, 1932.
- S. K. Lele.** Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Physics*, 103 :16, 1992.
- S. Maurel, J. Borée and J.L. Lumley.** Extended proper orthogonal decomposition : application to jet/vortex interaction. *Flow, Turbulence and Combustion*, 67 :125, 2001.
- R. Mittal and G. Iaccarino.** Immersed boundary method. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 37 :239, 2005.
- J. Mohd-Yosuf.** Combined immersed boundary/B-spline methods for simulation of flow in complex geometries. *Annu. Res. Briefs, Cent. Turbul. Res.*, page 317, 1997.
- P. Orlandi and R. Verzicco.** Vortex Rings Impinging on Walls : Axisymmetric and Three-Dimensional Simulations. *J. Fluid Mech.*, 256 :615, 1993.
- T. Poinso and S. K. Lele.** Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Physics*, 101 :104, 1992.



- E. M. Saiki and S. Biringen.** Numerical simulation of a cylinder in uniform flow : application of a virtual boundary method. *J. Comput. Physics*, 123 :450, 1996.
- T. Schönfeld and M. Rudgyardt.** Steady and unsteady flow simulations using the hybrid flow solver AVBP. *AIAA Journal*, 37 :1378, 1999.
- J. L. Steger, F. C. Dougherty and J. A. Benek.** A Chimera grid scheme. In *Advances in grid generation*, page 59. ASME FED-5, 1983.

## Bibliographie du chapitre 3

- M. Ballestra.** *Etude numérique de la formation et la dissipation des tourbillons créés par un jet conique monophasique.* Rapport de stage de DESS de mathématiques appliquées, Université Paris 6, 2002.
- G. K. Batchelor.** *An Introduction to Fluid Dynamics.* Cambridge University Press, Cambridge, New York, 7th edition, 1988.
- S. Benteboula.** *Résolution des équations de Navier–Stokes à faible nombre de Mach : Application à l’étude de l’anneau tourbillonnaire à masse volumique variable.* PhD thesis, Université de Marne-la-Vallée, 2006.
- S. Benteboula and I. Danaila.** Simulation numérique de l’injection gaz–gaz à masse volumique variable. *Congrès Français de Thermique*, 2006.
- S. Benteboula and I. Danaila.** Variable density vortex rings. In J. M. L. M. Palma and A. Silva Lopes, editors, *Advances in Turbulence XI*, page 771. Springer, 2007.
- I. Danaila.** *Code JETLES. Simulations numériques directes (DNS) et des grandes échelles (LES) des écoulements incompressibles en coordonnées cylindriques.* documentation du code jetles, Paris 6, 1999–2008.
- I. Danaila and S. Benteboula.** *Etude numérique et théorique des structures tourbillonnaires dans une injection gaz–gaz. Simulations numériques directes avec les codes JETLES et AVBP.* Rapport de contrat, Paris 6 et Institut Français du Pétrole, 2004.
- I. Danaila and J. Hélié.** Numerical simulation of the postformation evolution of a laminar vortex ring. *Phys. Fluids*, 20 :073602, 2008.
- A. W. Cook and J. J. Riley.** Direct numerical simulation of a turbulent reactive plume on a parallel computer. *J. Comput. Physics*, 129 :263–283, 1996.



- J. O. Dabiri and M. Gharib.** Fluid entrainment by isolated vortex rings. *J. Fluid Mech.*, 511 :311–331, 2004.
- M. Gharib, E. Rambod and K. Shariff.** A universal time scale for vortex ring formation. *J. Fluid Mech.*, 360 :121–140, 1998.
- F. B. Kaplanski and Y. A. Rudi.** A model for the formation of ”optimal” vortex ring taking into account viscosity. *Phys. Fluids*, 17 :087101, 2005.
- O.M. Knio, P.S. Worlikar and Najm H. N.** Conservative high-order finite-difference scheme for low-Mach number flows. *J. Comput. Physics*, 158 :71–97, 2000.
- A. Majda and J. Sethian.** The derivation and numerical solution of the equation for zero Mach number combustion. *Combust. Sci. Technol.*, 42 :185, 1985.
- P. Orlandi.** *Fluid Flow Phenomena : A Numerical Toolkit*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999.
- M. Rai and P. Moin.** Direct Simulations of Turbulent Flow Using Finite-Difference Schemes. *J. Comput. Physics*, 96 :15–53, 1991.
- P. G. Saffman.** *Vortex Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, New York, 1992.
- K. Shariff and A. Leonard.** Vortex rings. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 24 :235–279, 1992.
- R. Verzicco and P. Orlandi.** A finite-difference scheme for three-dimensional incompressible Flows in cylindrical coordinates. *J. Comput. Physics*, 123 :402–414, 1996.
- C. B. Vreugenhil and B. Koren.** *Numerical methods for advection-diffusion problems*, volume 45. Vieweg, Braunschweig, 1993.

## Bibliographie du chapitre 4

- H. Berestycki, E. Fernandez Cara and R. Glowinski.** A numerical study of some questions invortex ring theory. *RAIRO Analyse numérique*, 18 :7–85, 1984.
- I. Danaila and J. H  lie.** Numerical simulation of the postformation evolution of a laminar vortex ring. *Phys. Fluids*, 20 :073602, 2008.



- J. Blum, C. Boulbe and B. Faugeras.** Real time reconstruction of plasma equilibrium in a Tokamak. In *International Conference on burning plasma diagnostics, Villa Monastero, Varenna*, 2007.
- D. Das and J. H. Arakeri.** Transition of unsteady velocity profiles with reverse flow. *J. Fluid Mech.*, 374 :251–283, 1998.
- F. Durst, B. Schönung and M. Simons.** Steady ellipsoidal vortex rings with finite cores. *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, 32 :0156, 1981.
- M. J. Esteban.** Nonlinear elliptic problems in strip-like domains : symmetry of positive vortex rings. *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 7 : 365–379, 1983.
- D. Fargie and B. W. Martin.** Developing laminar flow in a pipe of circular cross-section. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 321 :461–476, 1971.
- L. E. Fraenkel and M. S. Berger.** A global theory of steady vortex rings in an ideal fluid. *Acta Math.*, 132 :13–51, 1974.
- P. M. Gresho and R. L. Sani.** *Incompressible Flow and the Finite Element Method, vol. 2.* Wiley, New York, 2000.
- J. Norbury.** A family of steady vortex rings. *J. Fluid Mech.*, 57 :417, 1973.
- O. Pironneau and P. M. Gresho.** Authors reply. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 56 :1966, 2008.
- R. L. Sani, J. Shen, O. Pironneau and P. M. Gresho.** Pressure boundary condition for the time-dependent incompressible Navier-Stokes equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 50 :673–682, 2006.

## Bibliographie du chapitre 5

- J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels and W. Ketterle.** Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates. *Science*, 292 :476, 2001.
- A. Aftalion.** *Vortices in Bose-Einstein Condensates.* Birkhauser, 2006.
- A. Aftalion and Q. Du.** Vortices in a rotating Bose-Einstein condensate : Critical angular velocities and energy diagrams in the Thomas-Fermi regime. *Phys. Rev. A*, 64 :063603, 2001.



- A. Aftalion and R. L. Jerrard.** Shape of vortices for a rotating Bose Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 66 :023611, 2002.
- A. Aftalion and T. Riviere.** Vortex energy and vortex bending for a rotating Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 64 :043611, 2001.
- W. Bao and Q. Du.** Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow. *Siam J. Sci. Comput.*, 25 :1674, 2004.
- W. Bao and Q. Du.** Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation. *Siam J. Appl. Math.*, 66 :758, 2006.
- J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García.** Vortex bending and tightly packed vortex lattices in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 64 :053611, 2001.
- S. K. Lele.** Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Computational Physics*, 103 :16, 1992.
- K. W. Madison, F. Chevy, V. Bretin and J. Dalibard.** Stationary States of a Rotating Bose-Einstein Condensate : Routes to Vortex Nucleation. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4443, 2001.
- K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard.** Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :806, 2000.
- M. Modugno, L. Pricoupenko and Y. Castin.** Bose-Einstein condensates with a bent vortex in rotating traps. *European Physical Journal D*, 22 :0203597, 2003.
- C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic and W. Ketterle.** Evidence for a Critical Velocity in a Bose-Einstein Condensed Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :2502, 1999.

## Bibliographie du chapitre 6

- A. Aftalion.** *Vortices in Bose-Einstein Condensates*. Birkhauser, 2006.
- A. Aftalion and I. Danaila.** Three-dimensional vortex configurations in a rotating Bose Einstein condensate. *Physical Review A*, 68 :023603, 2003.
- A. Aftalion and I. Danaila.** Giant vortices in combined harmonic and quartic traps. *Physical Review A*, 69 :033608, 2004.



- A. Aftalion and T. Riviere.** Vortex energy and vortex bending for a rotating Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 64 :043611, 2001.
- I. Danaila.** Three-dimensional vortex structure of a fast rotating Bose-Einstein condensate with harmonic-plus-quartic confinement. *Physical Review A*, 72 : 013605(1–6), 2005.
- V. Bretin.** *Rotations d'un condensat de Bose-Einstein.* PhD thesis, Université Paris 6, 2004.
- V. Bretin, S. Stock, Y. Seurin and J. Dalibard.** Fast Rotation of a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :050403, 2004.
- L.-C. Crasovan, V. M. Pérez-García, I. Danaila, D. Mihalache and L. Torner.** Three-dimensional parallel vortex rings in Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, 70 :033605, 2004.
- J. K. Kim and A. L. Fetter.** Dynamics of rapidly rotating Bose-Einstein condensates in a harmonic plus quartic trap. *Phys. Rev. A*, 72 :023619, 2005.
- A. E. Leanhardt, A. Görlitz, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, D. E. Pritchard and W. Ketterle.** Imprinting Vortices in a Bose-Einstein Condensate using Topological Phases. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :190403, 2002.
- K. W. Madison, F. Chevy, V. Bretin and J. Dalibard.** Stationary States of a Rotating Bose-Einstein Condensate : Routes to Vortex Nucleation. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4443, 2001.
- P. Rosenbusch, V. Bretin and J. Dalibard.** Dynamics of a Single Vortex Line in a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :200403, 2002.
- D. E. Sheehy and L. Radzihovsky.** Vortices in spatially inhomogeneous superfluids. *Phys. Rev. A*, 70 :063620, 2004.
- S. Stock, B. Battelier, V. Bretin, Z. Hadzibabic and J. Dalibard.** Bose-Einstein condensates in fast rotation. *Laser Physics Letters*, 2 :275, 2005.

## Bibliographie du chapitre 7

- W. Bao and Q. Du.** Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation. *Siam J. Appl. Math.*, 66 :758, 2006.
- Z. Hadzibabic, S. Stock, B. Battelier, V. Bretin and J. Dalibard.** Interference of an array of independent Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :180403, 2004.