

Annexe A

Méthodes numériques et tests du code de simulations directes BALAÏTOUS

En essayant continuellement, on finit par réussir. Donc : plus ça rate, plus on a de chance pour que ça marche.

Devise Shadok particulièrement bien adaptée aux simulations numériques

A.1 Historique et objectifs

BALAÏTOUS est un code parallèle de simulations magnétohydrodynamiques directes en trois dimensions développé pour l'étude de milieux plans anisotropes, comme les milieux stratifiés dans une direction par la gravité. Il a été initié par F. Califano et A. Mangeney dans le cadre de simulations astrophysiques et géophysiques (les méthodes numériques que nous présentons brièvement ici ont été testées par Califano (1996)). La parallélisation et les évolutions récentes du code pour les milieux incompressibles sont décrites dans deux rapports d'activité IDRIS (Lignières 1999, 2002). Le langage utilisé est du fortran 90. Un exemple de problème astrophysique traité avec cet outil (couche de mélange dans une zone radiative) peut être trouvé dans Lignières et al. (1998). Dans ce document, nous présentons le travail effectué au cours de cette thèse pour adapter ce programme au cas des milieux magnétiques *complètement compressibles* stablement ou instablement stratifiés. De tels problèmes physiques, comme nous l'avons vu au paragraphe 1.4, ont été abordés du point de vue numérique dans les trente dernières années par plusieurs groupes (Cambridge, Chicago, Boulder, Copenhague). Notre premier objectif a donc été de rendre le programme compétitif vis-à-vis de ces recherches

et de le valider en reprenant une partie de ces études. Trois fils conducteurs ont été suivis :

- un souci de fiabilité des résultats ;
- un souci de performance, associé entre autres aux contraintes posées par le sujet de thèse (simulations à grand rapport d’aspect tridimensionnelles) ;
- un souci de facilité d’utilisation, afin que des problèmes variés (et il n’en manque pas lorsqu’on mélange stratification et champ magnétique !) puissent être résolus sans qu’il y ait besoin d’apporter des modifications majeures au code source, et que le code soit utilisable dans le futur au sein du groupe de dynamique des fluides astrophysiques de Toulouse. À cette fin, une documentation complète du programme a été réalisée.

Respecter simultanément ces points essentiels du cahier des charges n’est pas une tâche évidente, car bien souvent l’optimisation passe par des sacrifices au niveau de la commodité d’utilisation. Cela dit, la structure du code avant les modifications apportées au cours de ce travail était telle qu’elle permettait d’envisager sereinement la conciliation de ces deux aspects.

Une description des méthodes numériques utilisées et du fonctionnement du code ainsi qu’une présentation de l’interface réalisée en parallèle pour le traitement des résultats sont proposées. Plus de détails sont donnés dans la documentation du programme. Nous présentons également les différents tests de fiabilité et de performance effectués sur le programme.

A.2 Fonctionnement général du code : méthodes numériques employées et parallélisation

A.2.a Organisation des données

Les équations (2.1), (2.2), (2.3), (2.4) du chapitre 2 sont résolues numériquement en faisant évoluer les variables v , T , ρ , et \mathbf{B} dans le temps. Dans le code ces variables sont contenues dans le tableau FF, contenant N_c champs, et de taille $N_x \times N_y \times N_z$.

Remarque

Comme au chapitre 5, N_x est le nombre de points dans la direction verticale. Les variables x , y , z utilisées dans le code ne correspondent pas à celles utilisées dans le système d’équations du chapitre 2.

A.2.b Schémas numériques de différentiation spatiale

Direction verticale

Le schéma vertical de différentiation est un schéma aux différences finies compactes d'ordre 6 ou 8 basé sur les travaux de Lele (1992). Il se situe à l'interface entre une méthode spectrale et un schéma classique de différences finies. Le principe général est de calculer une combinaison linéaire des dérivées suivant la direction verticale aux différents points de grille en fonction d'une combinaison linéaire des valeurs des fonctions en ces points. Des schémas de bords appropriés aux types de conditions aux limites (champs fixés, dérivées fixées) doivent être utilisés. On obtient alors un système linéaire inversible numériquement qui permet de calculer les dérivées spatiales dans la direction anisotrope.

Un des avantages de cette méthode est qu'elle possède une précision quasi-spectrale. La stabilité inconditionnelle du schéma a été prouvée pour l'ordre 6 dans le cas d'une équation d'advection (Carpenter et al. 1993). Du côté des inconvénients, les pas de temps requis sont plus restrictifs par rapport au cas des différences finies classiques.

- **Ordre 6**

Dérivée première. Le schéma intérieur pour la dérivée première s'écrit

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = \frac{a}{2\Delta x}(f_{i+1} - f_{i-1}) + \frac{b}{4\Delta x}(f_{i+2} - f_{i-2}), \quad (\text{A.1})$$

avec $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ et $b = 1/9$. Les schémas d'ordre 5 aux bords sont

$$f'_1 = \frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^8 a_i f_i, \quad (\text{A.2})$$

$$f'_N = -\frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^8 a_i f_{N+1-i}. \quad (\text{A.3})$$

On a $a_1 = -296/105$, $a_3 = -125/8$, $a_5 = -215/12$, $a_7 = -25/8$, $a_2 = 415/48$, $a_4 = 985/48$, $a_6 = 791/80$, $a_8 = 145/336$. Aux points adjacents aux bords les schémas suivants sont utilisés :

$$f'_2 = \frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^8 b_i f_i, \quad (\text{A.4})$$

$$f'_{N-1} = -\frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^8 b_i f_{N+1-i}, \quad (\text{A.5})$$

où $b_1 = -3/16$, $b_3 = 109/48$, $b_5 = 115/144$, $b_7 = 23/240$, $b_2 = -211/180$, $b_4 = -35/24$, $b_6 = -1/3$, $b_8 = -1/72$. Si la dérivée est connue, les expressions aux bords deviennent

$$f'_1 = f'_{\text{bas}}, \quad (\text{A.6})$$

$$f'_N = f'_{\text{haut}}. \quad (\text{A.7})$$

Dérivée seconde. Pour la dérivée seconde, le schéma intérieur est

$$\beta f''_{i-1} + f''_i + \beta f''_{i+1} = \frac{aa}{(\Delta x)^2} (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) + \frac{bb}{4(\Delta x)^2} (f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}), \quad (\text{A.8})$$

avec $\beta = 2/11$, $aa = 12/11$, $bb = 3/11$. Le schéma compact d'ordre 3 suivant est appliqué aux bords :

$$f''_1 + \beta_b f''_2 = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^4 aa_i f_i, \quad (\text{A.9})$$

$$f''_N + \beta_b f''_{N-1} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^4 aa_i f_{N+1-i}, \quad (\text{A.10})$$

où $\beta_b = 11$, $aa_1 = 13$, $aa_2 = -27$, $aa_3 = 15$, $aa_4 = -1$. Aux points adjacents aux bords, un schéma compact d'ordre 4 est utilisé :

$$\beta_{bb} f''_1 + f''_2 + \beta_{bb} f''_3 = \frac{aa_b}{(\Delta x)^2} (f_3 - 2f_2 + f_1), \quad (\text{A.11})$$

$$\beta_{bb} f''_{N-2} + f''_{N-1} + \beta_{bb} f''_N = \frac{aa_b}{(\Delta x)^2} (f_N - 2f_{N-1} + f_{N-2}), \quad (\text{A.12})$$

avec $\beta_{bb} = 1/10$, $aa_b = 6/5$. Si la dérivée est connue, on utilisera aux bords le schéma compact d'ordre 3 suivant :

$$f''_1 + 2f''_2 = -\frac{3}{\Delta x} f'_{\text{bas}} + \frac{3}{2(\Delta x)^2} (f_3 - f_1), \quad (\text{A.13})$$

$$f''_N + 2f''_{N-1} = \frac{3}{\Delta x} f'_{\text{haut}} + \frac{3}{2(\Delta x)^2} (f_{N-2} - f_N). \quad (\text{A.14})$$

- **Ordre 8**

Dérivée première. Dans ce cas, on prend le schéma compact d'ordre 8 pour les points intérieurs (voir Lele 1992), le schéma compact d'ordre 4 pour les points adjacents aux bords et les schémas compact d'ordre 4 suivants pour les bords.

$$f'_1 + \alpha f'_2 = \frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^4 a_i f_i, \quad (\text{A.15})$$

$$f'_N + \alpha f'_{N-1} = -\frac{1}{\Delta x} \sum_{i=1}^4 a_i f_{N+1-i}, \quad (\text{A.16})$$

où $\alpha = 3$, $a_1 = -17/6$, $a_2 = 3/2$, $a_3 = 3/2$, $a_4 = -1/6$.

Dérivée seconde. Les schémas de bord s'écrivent

$$f''_1 + \alpha f''_2 = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^5 a_i f_i, \quad (\text{A.17})$$

$$f''_N + \alpha f''_{N-1} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \sum_{i=1}^5 a_i f_{N+1-i}, \quad (\text{A.18})$$

avec $\alpha = 10$, $a_1 = (11\alpha + 35)/12$, $a_2 = -(5\alpha + 26)/3$, $a_3 = (\alpha + 9)/2$, $a_4 = (\alpha - 14)/3$, $a_5 = (11 - \alpha)/12$. Si la dérivée première est connue on utilise les schémas de bords décrits plus haut.

Direction horizontale

Dans les directions horizontales, pour lesquelles on impose des conditions aux limites périodiques, il est intéressant d'utiliser une méthode spectrale. Celle-ci est implémentée dans BALAÏTOS par l'intermédiaire de la bibliothèque FFTW parallèle. Pour le moment la librairie FFT Cray peut aussi traiter les FFTs, mais seulement pour le cas des milieux non compressibles. L'utilisation de ces bibliothèques permet une parallélisation importante du code, indispensable pour des simulations à haute résolution. Cette parallélisation est effectuée sur une des directions horizontales. Autrement dit, chaque processeur voit seulement des tranches verticales d'atmosphère (voir figure A.1).

Dans l'espace réel, seulement $N_{zp} = N_z/N_{\text{proc}}$ points sont vus par un processeur, et dans l'espace spectral, la répartition des données par FFTW est telle que N_y/N_{proc} modes sont visibles sur chaque processeur, tous les modes de Fourier dans l'autre direction horizontale étant visibles (il s'agit simplement d'une transposition des données lors du calcul de la FFT).

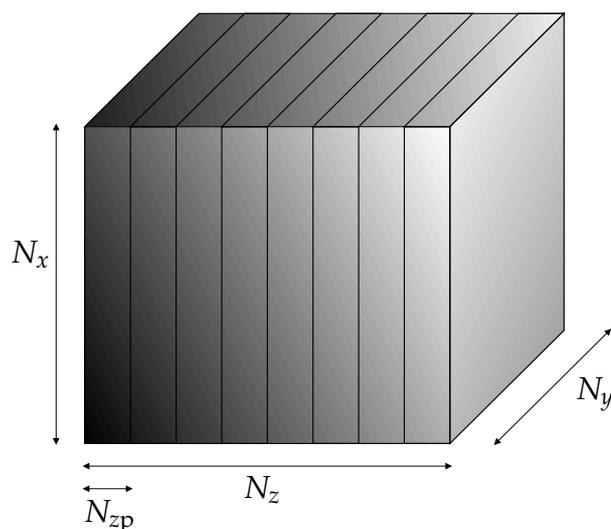


FIG. A.1 – Répartition des données de la boîte de simulation sur les différents processeurs. La parallélisation de la FFTW est effectuée en découpant des tranches de $N_x \times N_y \times N_{zp}$ points par processeur.

Dealiasing

Dans BALAÏTOUS, seules les dérivées sont calculées dans l'espace spectral. L'ensemble des autres opérations sur les champs se fait dans l'espace réel, y compris en ce qui concerne termes d'advection. D'autres groupes (Brummell et al. 2002) préfèrent tout calculer dans l'espace spectral et effectuer un bref passage dans l'espace réel pour le calcul des termes d'advection (qui se résument alors de simples multiplications, plus rapides et plus faciles à mettre en œuvre que des produits de convolution). Dans les deux cas, la troncation de la transformée de Fourier discrète à l'ordre N , et le calcul des termes d'advection dans l'espace réel ont pour conséquence l'apparition de modes spurieux (Canuto et al. 1988). On peut noter que les différences finies compactes agissent naturellement comme un filtre passe-bas et suppriment en grande partie ce phénomène. La situation est différente pour la partie spectrale du schéma spatial.

Un filtre de *dealiasing* a donc été implémenté pour supprimer les modes parasites qui ne respectent pas le critère d'échantillonnage de Shannon-Nyquist. En pratique, pour N modes de Fourier, seulement $2N/3$ modes sont alors utilisables. Pour éviter une pollution du spectre (et par voie de conséquence de la solution obtenue) par les modes incorrectement résolus, on peut mettre à 0 leur amplitude à chaque pas de temps (on parle de *dealiasing* par troncation, par opposition à la technique de *dealiasing* par déphasage). Il peut être intéressant de faire des tests avec/sans *dealiasing* afin de voir si la solution sans troncation est fondamentalement différente de la solution tronquée. Si tel n'est pas le cas on a tout avantage à ne pas utiliser le *dealiasing*, car celui-ci fait augmenter la mémoire nécessaire à la simulation et surtout nécessite d'effectuer des transformées de Fourier aller et

retour supplémentaires (6 actuellement, sachant que le code dans sa version purement hydrodynamique sans *dealiasing* effectue 5 FFTs aller et 10 FFTs retour à chaque itération temporelle).

A.2.c Schéma temporel

Le schéma temporel est un algorithme de Runge-Kutta d'ordre 3 ou 4. Il s'agit d'un schéma complètement explicite, décrit dans Demuren et al. (2001). L'avantage principal de ce schéma est qu'il ne requiert qu'un faible stockage mémoire.

A.2.d Le dilemme compressible / incompressible

Il existe une différence essentielle du point de vue numérique entre les problèmes incompressibles et compressibles, qui doit être discutée ici. Dans le cas d'un milieu incompressible, il n'existe pas d'équation d'évolution pour la densité, puisque l'équation de continuité se limite à une contrainte de divergence nulle pour la vitesse. La difficulté réside alors dans le calcul du champ de pression à chaque itération, sous la contrainte que la divergence du champ de vitesse soit nulle. Du point de vue numérique, cela passe par la résolution d'une équation de Poisson sur la pression et l'inversion d'un système linéaire. Cette étape de l'itération demande évidemment un temps de calcul important.

Au contraire, les problèmes compressibles sont munis d'une équation d'évolution en temps pour la densité, qui devient de ce point de vue une variable « comme les autres ». On pourrait donc penser que se lancer dans les simulations incompressibles est plus délicat. Évidemment, ce n'est pas complètement le cas, car l'existence de la nouvelle équation d'évolution a un coût élevé : celui du calcul de la propagation d'ondes sonores. Numériquement parlant, ce phénomène physique est à l'origine d'une réduction importante du pas de temps dans la simulation. Le calcul d'un pas de temps sera donc plus rapide dans le cas compressible, mais il faudra plus de pas de temps pour simuler le même temps physique pour échantillonner la propagation des ondes sonores correctement.

A.2.e Interface de traitement

Avant de passer aux tests proprement dits, signalons qu'une interface de traitement et de visualisation 3D et d'analyse des données a été développée au cours de ce travail, qui est maintenant disponible avec le code. Elle a permis de réaliser les illustrations de ce manuscrit. Le développement d'un tel programme est assez laborieux car il doit prendre en compte la quantité importante de données générée par le code principal. Pour les simulations que nous avons effectuées, chaque « image » de la boîte occupe en effet quasiment 4 Go, qu'il est impossible de charger avec les PCs actuels. Il faut donc procéder à des découpages des données, et il peut dès lors s'avérer délicat de calculer certaines quantités comme des fonctions de corrélation, pour lesquelles il est nécessaire d'avoir un accès simultané à un sous-ensemble important des données totales.

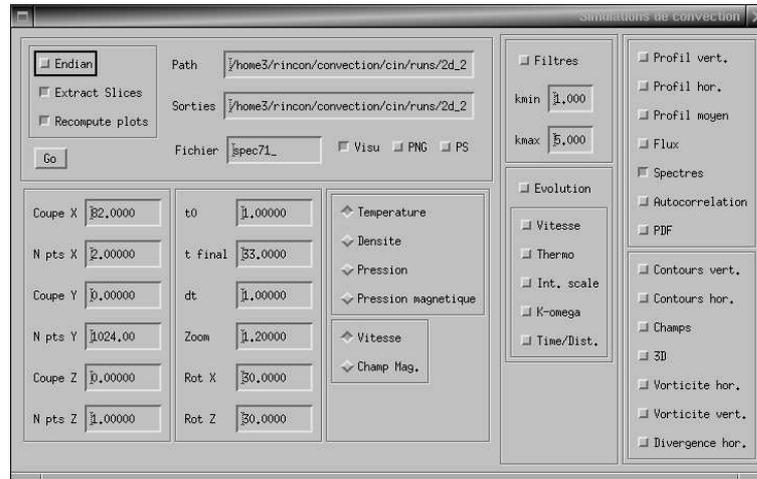


FIG. A.2 – Interface de visualisation IDL pour les simulations avec BALAITOUS.

A.3 Tests numériques

A.3.a Pas de temps et résolution spatiale

Le problème de la magnétoconvection en milieu compressible fait intervenir de nombreuses échelles de temps, comme en témoigne le nombre de paramètres physiques donnés au chapitre 2 : trois échelles de temps diffusifs (magnétique, thermique, visqueuse), une échelle de temps sonore, une échelle de temps alfvénique, une échelle de temps de chute libre (qui constitue l'échelle de temps dynamique la plus rapide possible). Le pas de temps choisi pour réaliser la simulation doit être inférieur à tous ces pas de temps si l'on souhaite propager l'information d'un point de grille à un autre correctement (et éviter les instabilités numériques...). On doit donc avoir

$$\Delta t \leq \min \left\{ \frac{\Delta x^2}{\nu}, \frac{\Delta x^2}{\kappa}, \frac{\Delta x^2}{\eta}, \frac{\Delta x}{c_s}, \frac{\Delta x}{V_A}, \sqrt{\frac{\Delta x}{g}} \right\}. \quad (\text{A.19})$$

Il faut multiplier en pratique par un facteur de sécurité de l'ordre de 0.05 à 0.4 le Δt réel le plus contraignant pour obtenir le pas de temps numérique satisfaisant, mais ceci dépend à la fois du schéma numérique et du phénomène physique le plus difficile à résoudre temporellement. Dans le cas des ondes sonores, ce facteur est bien connu sous le nom de condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL). Quelques exemples tirés de Lele (1992) sont donnés dans le tableau A.1. Ces facteurs de sécurité ne donnent qu'une borne supérieure. On observe souvent que des facteurs plus contraignants doivent être adoptés. Ils peuvent en outre dépendre du type de conditions aux limites utilisées. Pour les problèmes de convection abordés dans cette thèse (différences finies compactes d'ordre 6 et

Runge-Kutta d'ordre 3), des facteurs de sécurité de 0.15 et 0.125 ont été utilisés respectivement pour les pas de temps sonore et diffusif.

Équation	RK ₃			RK ₄		
	DFC ₆	DFC ₈	FFT	DFC ₆	DFC ₈	FFT
Diffusion	0.36	0.33	0.25	0.42	0.39	0.29
Advection	0.87	0.78	0.55	1.43	1.29	0.9

TAB. A.1 – Facteurs de sécurité relatifs à divers phénomènes physiques pour les différences finies compactes, les méthodes spectrales et le schéma de Runge-Kutta (ordre 3 RK₃ et ordre 4 RK₄). La méthode spectrale est plus contraignante que la méthode aux différences finies compactes.

Remarque | Lorsque l'échelle de temps limitante est une échelle diffusive (qui dépend des nombres de Prandtl choisis) il faut faire très attention à choisir un facteur de sécurité en accord avec le coefficient de diffusion, qui peut varier au travers de la couche de fluide si on a choisi des coefficients dynamiques constants! ($\nu = \mu/\rho$, et ρ est plus petit en haut de la couche qu'en bas).

A.3.b Tests de performances et de parallélisation

Les tests ont été menés sur PC (Linux) AMD Athlon 1.5 GHz avec 1 Go de RAM, sur SGI Origin 3800 (processeurs R14000 cadencés à 500 MHz) au CINES et sur l'IBM SP4 de l'IDRIS (processeurs cadencés à 1.3 GHz). Dans tous les cas la librairie FFTW a été employée pour la partie spectrale du code (sans *dealiasing*), le schéma de différences finies compactes d'ordre 6 a été utilisé, ainsi que l'algorithme de Runge-Kutta d'ordre 3. Les tests 2D sont dans une direction FFT et dans l'autre différences finies compactes.

Comparaison de performances entre architectures

Résolution	Athlon	SGI	SP4
64×64	0.045	0.087	0.041
96×96	0.1	0.19	0.083
128×128	0.2	0.34	0.14
256×256	1.0	1.6	0.56
512×512	4.6	7.9	2.7

TAB. A.2 – Temps de calcul monoprocesseur (en secondes) d'un pas de temps pour des simulations 2D purement hydrodynamiques (5 champs).

Résolution	Athlon	SGI	SP4	Résolution	Athlon	SGI	SP4
62×64	0.042	0.084	0.04	82×32	0.028	0.057	0.038
82×64	0.058	0.111	0.053	82×64	0.059	0.11	0.053
96×64	0.066	0.129	0.062	82×96	0.088	0.16	0.073
100×64	0.069	0.132	0.064	82×128	0.11	0.22	0.083
128×64	0.095	0.16	0.083	82×256	0.25	0.45	0.15
140×64	0.098	0.185	0.089	82×512	0.61	0.92	0.31
164×64	0.115	0.218	0.11	82×1 024	1.43	2.07	0.76

TAB. A.3 – Influence des résolutions verticale (gauche) et horizontale (droite) sur le temps de calcul monoproc (en secondes) d'un pas de temps pour des simulations 2D purement hydrodynamiques. On observe une loi linéaire par rapport au nombre de points dans la direction verticale. En revanche, l'efficacité des FFTs diminue pour un grand nombre de points.

Résolution	Athlon	SGI	SP4
82×64×64	8.6	11.6	4.82
82×128×128	42.7	56.2	30
82×256×256	217	292	147

TAB. A.4 – Temps de calcul monoproc (en secondes) d'un pas de temps pour des simulations 3D purement hydrodynamiques. À noter les meilleures performances relatives du SGI par rapport au PC comparé au cas 2D.

Efficacité de la parallélisation

Ces tests ont été menés sur SGI Origin 3800 et IBM SP4 pour des simulations 3D purement hydrodynamiques. L'efficacité de la parallélisation est donnée par

$$\eta = \frac{T_{\text{mono}}}{N_{\text{proc}} \times T_{N_{\text{proc}}}},$$

où T_{mono} est le temps réel de calcul d'un pas de temps calculé sur un unique processeur, et $T_{N_{\text{proc}}}$ est le temps réel de calcul pour la même résolution lorsque le code est parallélisé sur N_{proc} . Les temps de calcul pour des résolutions importantes peuvent être réduits de manière directement proportionnelle au nombre de processeurs pour peu que l'efficacité de la parallélisation soit bonne. Pour la FFTW, le maximum de processeurs utilisable pour que la parallélisation soit intéressante est tel que $N_{\text{proc}}^2 = N$, où N est le nombre de points dans chacune des directions horizontales. Pour la résolution $256 \times 256 \times 82$, par exemple, l'efficacité est excellente jusqu'à 16 processeurs.

On peut voir que les PCs se prêtent bien aux simulations 2D, qui sont peu parallélisables. Enfin, la parallélisation du code semble être meilleure sur l'IBM

Résolution	N_{proc}	$T_{N_{\text{proc}},\text{SGI}}$ (s)	η_{SGI}	$T_{N_{\text{proc}},\text{SP4}}$	η_{SP4}
$82 \times 32 \times 32$	1	2.2	1	0.72	1
	2	1.45	0.75	0.46	0.78
	4	1.17	0.47	0.34	0.52
	8	1.24	0.22	0.47	0.19
$82 \times 64 \times 64$	1	11.6	1	4.82	1
	2	6.6	0.87	2.39	1
	4	3.7	0.78	1.18	1
	8	2.7	0.53	0.9	0.67
$82 \times 128 \times 128$	1	56.2	1	30	1
	2	29.1	0.96	15.3	0.98
	4	15.5	0.9	5.4	1.38
	8	7.5	0.93	2.8	1.34
	16	6.5	0.54	2.2	0.85
$82 \times 256 \times 256$	1	292	1	147	1
	2	142.5	1.03	66	1.1
	4	60.2	1.2	24	1.5
	8	47.8	0.76	13.5	1.35
	16	19	0.95	6.9	1.3
	32	23.9	0.38	6.2	0.74

TAB. A.5 – Efficacité de la parallélisation pour des simulations 3D purement hydrodynamiques sur Origin 3800 et IBM SP4. Les meilleures efficacités sont obtenues lorsque le nombre de points dans une direction horizontale est égal à N_{proc}^2 .

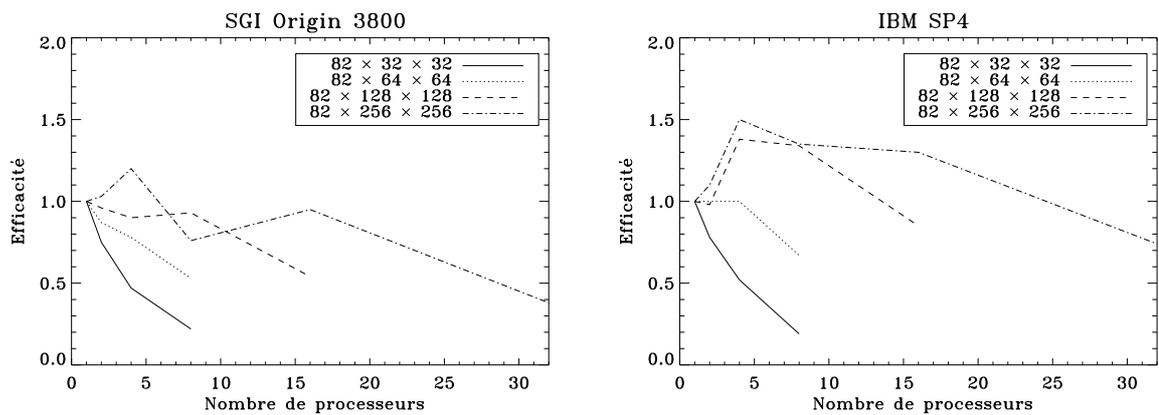


FIG. A.3 – Représentation des résultats du tableau A.5 pour SGI (à gauche) et IBM SP4 (à droite).

de l'IDRIS et les temps de calcul sont sensiblement réduits sur cette machine par rapport à l'Origin du CINES.

A.4 Tests du code sur quelques problèmes de physique

Dans cette section, plusieurs tests sur « l'ABC » de la physique des milieux compressibles magnétisés sont présentés. En dépit de la simplicité apparente des exemples, ceux-ci constituent des vérifications importantes du bon fonctionnement du programme. Ils ont permis de débusquer divers problèmes et d'améliorer considérablement la compréhension du comportement du code.

A.4.a Ondes sonores

La première vérification du bon fonctionnement d'un code compressible est bien sur la propagation des ondes sonores. Afin d'obtenir une validation quantitative, nous avons donc effectué ce test dans le cas d'une atmosphère isotherme en injectant dans l'atmosphère des modes propres dont les fréquences propres sont connues par ailleurs. Avant de procéder, nous devons cependant déterminer les paramètres physiques à utiliser dans le test. En effet l'équation d'onde dans un milieu stratifié est compliquée par l'existence d'ondes de gravité, et il convient de la simplifier.

Expression des fréquences dans le cas de l'atmosphère isotherme

Les fréquences ou pulsations caractéristiques pour ce problème, exprimées par l'intermédiaire des paramètres définis au chapitre 2, s'expriment selon

$$- N^2 = (\Lambda/H) (1 - 1/\gamma),$$

$$- \omega_c = 1/2\sqrt{(\gamma\Lambda)/H}.$$

N est la fréquence de Brünt-Väisälä, et ω_c est la pulsation de coupure des ondes acoustiques de l'atmosphère. L'équation caractéristique des oscillations adiabatiques gravito-acoustiques pour une perturbation ζ est donnée (Lamb 1932, Les 1993) par

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_c^2 \right) \frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} - c_s^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Delta \zeta - N^2 c_s^2 \Delta_h \zeta = 0, \quad (\text{A.20})$$

où Δ_h est la partie horizontale de l'opérateur laplacien. Notons que l'absence de diffusion est impossible à réaliser numériquement, si bien qu'on calcule en réalité des fréquences de modes faiblement non-adiabatiques (le temps de propagation caractéristique d'une ondes est toujours très inférieur aux temps diffusifs du système).

Les modes acoustiques

Pour obtenir les fréquences acoustiques dans le fluide, on impose la limite haute-fréquence $\omega^2 \gg N^2$ dans l'équation (A.20) en prenant $H \rightarrow +\infty$, ce qui permet de retrouver l'équation d'ondes habituelle :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \zeta - c_s^2 \Delta \zeta = 0. \quad (\text{A.21})$$

Si on prend des conditions aux limites stress-free sur la vitesse, dans la limite adiabatique, il faut imposer des ventres de température et de densité sur les parois inférieure et supérieure de la couche. En négligeant les dérivées d'ordre $1/H$, on obtient les solutions stationnaires en modes propres, pour une couche de rapport d'aspect 1 (Landau et Lifshitz 1971) :

$$\begin{aligned} v_z &= -A \sin(n\pi z) \cos(2m\pi x) \sin \omega t, \\ v_x &= -\frac{2m}{n} A \cos(n\pi z) \sin(2m\pi x) \sin \omega t, \\ \delta\rho &= \frac{\sqrt{n^2 + 4m^2}}{n} c_s^{-1} A \cos(n\pi z) \cos(2m\pi x) \cos \omega t, \\ \delta T &= (\gamma - 1) \delta\rho. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Validation quantitative

Pour $H = 10\,000$ et $c_s = 400$ (en unités thermiques), la fréquence fondamentale est 63.66. On injecte initialement le mode $n = 1, m = 2$ pour les perturbations. La période théorique (en unités sonores) est alors de $1/\sqrt{5} = 0.447$, vérifiable sur la figure A.4. On peut également apprécier sur cette figure la décroissance exponentielle des oscillations sur une échelle de temps (en unités sonores) $\tau_{dec} = c_s/(5\pi^2(1 + \text{Pr})) = 4.05$, liée à la non-adiabaticité ($\text{Pr} = 1$).

A.4.b Convection dans un polytrophe sans champ magnétique

Principe du test

On peut obtenir directement les taux de croissance de l'instabilité convective dans un polytrophe (Gough et al. 1976) en utilisant le solveur de problèmes aux valeurs propres généralisées LSB mentionné au chapitre 3, et imposer comme condition initiale dans le programme les vecteurs propres ainsi obtenus. Le test consiste à vérifier le taux de croissance des solutions linéaires de l'instabilité lors des premiers pas de temps de la simulation.

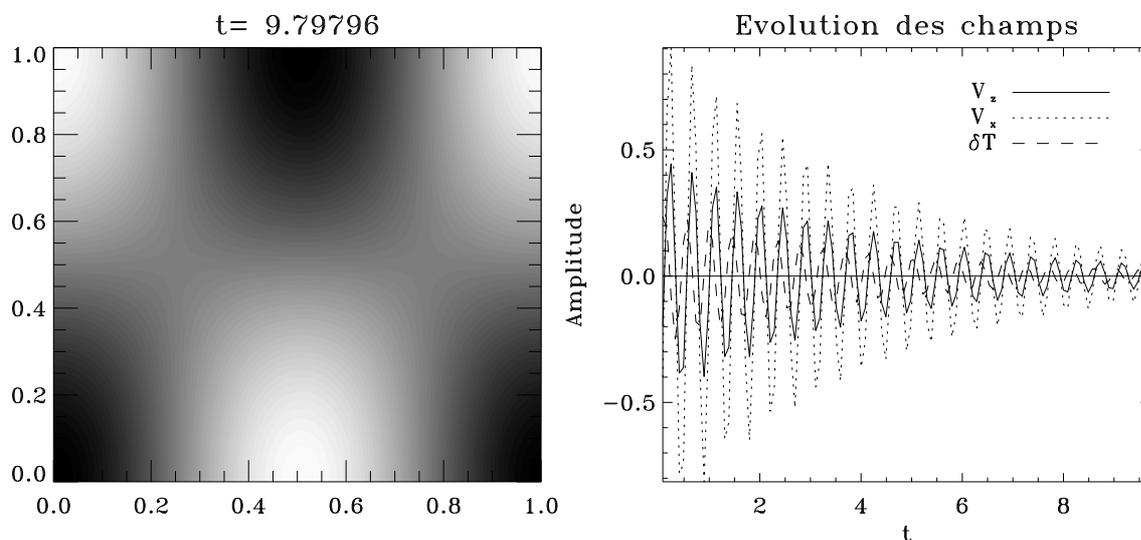


FIG. A.4 – Perturbation de température et évolution du mode propre acoustique $n = 1, m = 2$. La période du mode est de 0.447, exprimé en fonction de la période fondamentale de vibration (unité utilisée sur la courbe). Le rapport 2 entre l'amplitude des vitesses est celui prévu par la théorie (la perturbation de température a été multipliée par c_s sur la courbe).

Validation quantitative

On se place dans un polytrophe $m = 1$, caractérisé par une température z_0 en haut de la couche. Le nombre de Rayleigh au milieu de la couche est super-critique. Le vecteur d'onde horizontal est $a = \pi$. Le taux de croissance est λ (pour une dépendance des variables en $\exp[\lambda t]$). Le test est effectué pour plusieurs types de conditions aux limites sur la température (T=température fixée, F=flux fixé) afin de tester la validité des schémas de bords des différences finies compactes sur les deux parois. Les conditions aux limites sur la vitesse sont stress-free. Divers nombres de Prandtl et z_0 ont été utilisés pour conforter le test. Les résultats sont tout à fait satisfaisants, comme en témoigne le tableau A.6.

A.4.c Instabilité de magnétoconvection - Overstabilité

L'overstabilité magnétique est un exemple de convection dite « double diffusive », car elle fait intervenir deux nombres de Prandtl (de fait, on devrait plutôt dire « triple diffusive ») : le nombre de Prandtl thermique, et le nombre de Prandtl magnétique. Il s'agit en fait de convection en présence d'un champ magnétique, l'intensité de celui-ci étant déterminée par le nombre de Chandrasekhar Q . Le couplage entre modes de convection et modes magnéto-acoustiques fait apparaître un régime d'oscillations lorsque le nombre de Prandtl magnétique est su-

Cond. lim.	R	z_0	Pr	λ_{th}	λ_{sim}
TT	5 000	0.1	1	39.95	39.94
TT	5 000	0.1	10	87.40	87.43
TT	5 000	0.01	1	36.62	36.61
TT	40 000	0.1	1	194.1	194.1
FF	5 000	0.1	10	97.8	97.8
FF	5 000	0.01	1	43.83	43.89
FF	40 000	0.1	1	203.6	203.6
FT	5 000	0.1	10	89.59	89.61
FT	5 000	0.01	1	39.72	39.50
FT	40 000	0.1	1	194.45	194.41
TF	5 000	0.1	10	96.14	96.07
TF	5 000	0.01	1	41.43	41.1
TF	40 000	0.1	1	203.36	203.37

TAB. A.6 – Taux de croissance de l’instabilité convective sans champ magnétique, donnés par la théorie linéaire et calculés par BALAÏT OUS dans diverses configurations d’atmosphère.

périeur au nombre de Prandtl thermique. Le rapport entre ces deux nombres est

$$\zeta = \frac{\eta}{\kappa} \propto \rho. \quad (\text{A.23})$$

Il dépend de la profondeur comme ρ dans le cas d’un milieu stratifié avec une conductivité thermique constante. Physiquement, pour qu’un comportement oscillant puisse se manifester, il faut que le champ magnétique diffuse moins que la température, afin que la tension magnétique des lignes de champ puisse agir comme une force de rappel sur les modes convectifs (si la diffusion magnétique est trop importante, les lignes de champ « glissent » au travers du fluide). Dans le cas où $\zeta > 1$ partout dans le fluide, la convection ne peut apparaître que par une bifurcation stationnaire. L’étude linéaire est effectuée par Chandrasekhar (1961).

Principe du test

L’instabilité de magnétoconvection (ou overstabilité magnétique) est un test intéressant, car elle fait intervenir à la fois les termes compressibles, magnétiques, non-linéaires, et non-adiabatiques des équations. Elle permet donc de valider simultanément le comportement du code sur plusieurs points essentiels. Le test consiste à retrouver des résultats 2D relatifs à un modèle de taches solaires (Weiss et al. 1990) sur plusieurs modes overstables de polytropes dans le régime non-linéaire. On peut calculer le taux de croissance initial de l’instabilité, la pulsation des oscillations dans le régime non-linéaire, ainsi que le flux d’énergie moyen, représenté par la moyenne temporelle du nombre de Nusselt $\langle \text{Nu} \rangle$. Enfin, on vérifiera la transition d’un régime périodique à un régime apériodique autour d’une

valeur critique du nombre de Rayleigh évalué au milieu de la couche. Une étude pour différents ζ est effectuée pour tester les termes diffusifs.

Validation quantitative

Les paramètres utilisés pour le premier test sont les suivants (Weiss et al. 1990, p. 439) : $\gamma = 5/3$, $z_o = 0.1$, $m = 1$, $\text{Pr} = 1$, $\zeta_{mid} = 0.6$ (ou $\text{Pr}_m = 0.909$ en bas de la couche). Le rapport d'aspect est $4/3$ (vecteur d'onde horizontal $a = 4.71$), des conditions aux limites de température fixée sont appliquées et le champ magnétique au niveau des parois est vertical. Le nombre de Chandrasekhar vaut 2 000. Pour cet ensemble de paramètres, la convection se met en place sous forme oscillante si $R > 29\,751$ (bifurcation de Hopf) et une bifurcation fourche apparaît ensuite pour $R = 59\,475$. Trois simulations sont réalisées, pour $R = 50\,000$ (régime périodique), $R = 60\,000$ (régime de transition), et $R = 80\,000$ (régime chaotique). L'évolution temporelle de la convection est illustrée sur la figure A.5.

Dans le deuxième test, les paramètres utilisés sont identiques, sauf $Q = 1\,000$ et $\zeta_{mid} = 1.2$ ($\text{Pr}_m = 0.454$ en bas). Le nombre de Rayleigh vaut 47 000 (figure 15 de Weiss et al. (1990)). L'ensemble des résultats est résumé dans le tableau A.7.

Paramètres	Test	Weiss et al. (1990)/théorie	Simulation
$\zeta_{mid} = 0.6,$	τ	48.8	48.8
$Q = 2\,000,$	ω	91.9	92.3
$R = 50\,000$	$\langle \text{Nu} \rangle$	1.5	1.4
$\zeta_{mid} = 0.6,$	τ	139.9	140.3
$Q = 2\,000,$	ω	89.2	89.7
$R = 60\,000$	$\langle \text{Nu} \rangle$	1.8	1.78
$\zeta_{mid} = 1.2,$	τ	108.1	108
$Q = 1\,000,$	ω	51.8	52
$R = 47\,000$	$\langle \text{Nu} \rangle$	1.58	1.54

TAB. A.7 – Comparaison entre les résultats de Weiss et al. (1990) et la simulation avec BALAÏT_OUS pour le taux de croissance τ de l'instabilité overstabile dans le régime linéaire, la pulsation dans le régime non-linéaire, et la moyenne temporelle du nombre de Nusselt $\langle \text{Nu} \rangle$ prise en $z = z_o$. Un excellent accord entre les deux est obtenu.

A.5 Conclusions

Dans cette annexe, les propriétés essentielles du programme BALAÏT_OUS ont été décrites. Les tests de vitesse et de parallélisation ont montré qu'une utilisa-

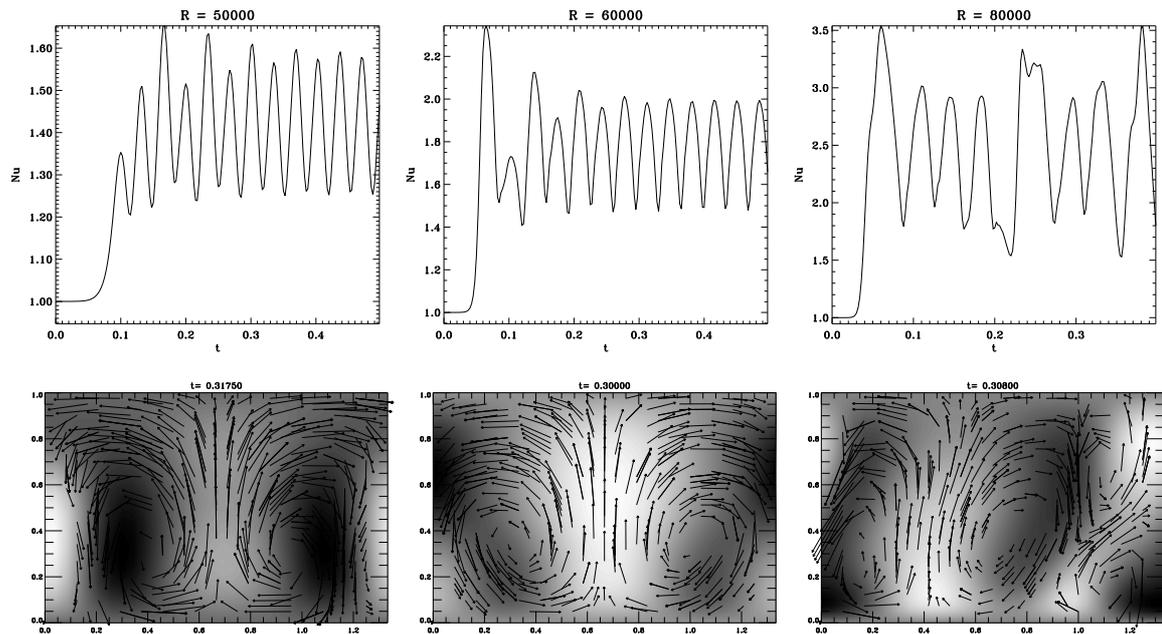


FIG. A.5 – Évolution au cours du temps du nombre de Nusselt pour les trois simulations avec $R = 50\,000$, $R = 60\,000$, et $R = 80\,000$, illustrant la transition du régime périodique au régime chaotique pour $\zeta_{mid} = 0.6$ (la valeur de Nu oscille deux fois plus rapidement que le mode lui-même). En dessous, un instantané de chacune des simulations représentant le champ de vitesses et le champ de température. À noter l'absence de symétries spatiales dans le dernier cas contrairement aux deux régimes précédents, caractéristique des transitions vers la turbulence.

tion performante du code sur des architectures parallèles était possible. Ils ont également permis de caractériser les paramètres numériques requis pour une simulation de convection à grand rapport d'aspect.

L'ensemble des tests physiques a d'autre part abouti à une vérification quantitative des aptitudes du programme à reproduire des processus fondamentaux à l'œuvre dans les milieux astrophysiques stratifiés et magnétisés (ondes sonores, ondes d'Alfvén, convection, etc.), ce qui nous permet d'envisager avec sérénité son utilisation dans le cadre de simulations plus avancées.

