



HAL
open science

Étude théorique et numérique des écoulements cisailés libres à masse volumique fortement variable

Nicolas Lardjane

► **To cite this version:**

Nicolas Lardjane. Étude théorique et numérique des écoulements cisailés libres à masse volumique fortement variable. Modélisation et simulation. Université d'Orléans, 2002. Français. NNT: . tel-00006483

HAL Id: tel-00006483

<https://theses.hal.science/tel-00006483>

Submitted on 18 Jul 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Étude théorique et numérique des écoulements cisailés libres à masse volumique fortement variable

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 31 mai 2002

pour l'obtention du

Doctorat de l'université d'Orléans
(spécialité énergétique - mécanique des fluides)

par

Nicolas LARDJANE

Composition du jury

<i>Président :</i>	M. Wolfgang Koschel	Professeur à l'Université d'Aix-La-Chapelle
<i>Rapporteurs :</i>	M. Jean-Pierre Bertoglio M. Pierre Sagaut	Directeur de Recherche au CNRS-LMFA Lyon Maître de Recherche à l'ONERA
<i>Examineurs :</i>	M. Iskender Gökalp M. Ivan Fedioun M. Boujema Izrar	Directeur de thèse – Directeur de Recherche LCSR Directeur de thèse – Maître de Conférences à l'ESEM Professeur à l'Université d'Orléans

Mis en page avec la classe thloria.

Avant-Propos

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire ont été menés au sein de l'équipe « Combustion et Turbulence » du Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs, UPR 4211 du CNRS, entre l'été 1998 et l'automne 2001.

C'est durant mon année de DEA que j'ai rencontré Iskender Gökalp – alors Directeur de Recherche au LCSR. Sa volonté de promouvoir la Recherche Orléanaise et son profond désir de former de jeunes chercheurs nous ont conduit à travailler ensemble. Le sujet de thèse qu'il me proposait était simple (du moins dans son énoncé) : développer l'activité de calcul numérique sur la turbulence dans les écoulements à masse volumique variable. L'objectif sous-jacent étant, à moyen terme, d'obtenir un ensemble d'outils informatiques cohérents qui permette un lien entre les différentes activités de modélisation du laboratoire. A énoncé simple, problème complexe...

C'est auprès d'Ivan Fedioun, Maître de Conférences à l'École Supérieure de l'Énergie et des Matériaux que j'ai obtenu l'aide technique nécessaire pour mener à bien cette étude. Plus qu'un second Directeur de Thèse, Ivan est devenu, au fil du temps, un véritable compagnon de travail. Sa rigueur et sa motivation ont été très stimulantes, les nombreuses feuilles de papier noircies sont là pour en témoigner.

Juger un travail de thèse n'est pas chose aisée. Pour cela, je tiens à remercier Messieurs Jean-Pierre Bertoglio et Pierre Sagaut d'avoir accepté le rôle délicat de rapporteur. Que Monsieur Boujema Izrar soit également remercié d'avoir participé à l'examen de ce travail, tout comme Monsieur Wolfgang Koschel qui m'a fait l'honneur de présider ce jury.

Je souhaite témoigner ma gratitude à Christian Chauveau, Murielle Chevrier, Brahim Sarh, et plus généralement à tous les membres du LCSR grâce à qui cette thèse s'est déroulée dans des conditions idéales. Mes amis, Thomas Laverne, Joel Pagé, David Pavé et les autres, merci pour votre compagnie. Je tiens à décerner une mention spéciale à Bérangère Mesnier, à mon grand ami Christophe Jonchère ainsi qu'à sa femme Claire pour les nombreuses soirées passées ensemble, je n'oublie pas non plus mon compère Xavier Gosset, sa femme Florence et le petit Timothée.

Ma Famille a également été présente tout au long de ces années de thèse. Je tiens à remercier de tout mon coeur mes parents. Mon père, Idir, pour ses nombreux conseils avisés et ma mère, Martine, pour son soutien constant. Mon frère Karim/Eric, ma soeur Sandra, ainsi que mes grands-parents, ne sont pas étrangers à la motivation et l'envie de bien faire qui m'habitent, merci. Enfin, je conclurais ces remerciements en rendant hommage à Delphine pour sa patience lors de la rédaction du mémoire et pour tout le bonheur qu'elle m'apporte.

Mais je ne craindrai pas de dire que je pense avoir eu beaucoup d'heur de m'être rencontré dès ma jeunesse en certains chemins, qui m'ont conduit à des considérations et des maximes, dont j'ai formé une méthode, par laquelle il me semble que j'ai moyen d'augmenter par degrés ma connaissance, et de l'élever peu à peu au plus au point, auquel la médiocrité de mon esprit et la courte durée de ma vie lui pourront permettre d'atteindre.

Le discours de la méthode

René Descartes

Table des matières

Introduction générale	1
------------------------------	----------

Partie I Simulation des grandes échelles	5
---	----------

Chapitre 1 Concepts de base	7
------------------------------------	----------

1.1 Généralités	7
1.2 Équations de bilan	9
1.2.1 Écoulement compressible multi-espèces	9
1.2.2 Mélange binaire	11
1.2.3 Écoulement compressible mono-espèce	12
1.2.4 Écoulement incompressible mono-espèce	12

Chapitre 2 Filtrage	15
----------------------------	-----------

2.1 Filtrage continu	15
2.1.1 Filtrage homogène	15
2.1.2 Filtrage non homogène	16
2.1.3 Extension au cas compressible	18
2.2 Filtrage discret	18
2.2.1 Filtre discret homogène	19
2.2.2 Filtre discret inhomogène	22

Chapitre 3 Équations filtrées	25
3.1 Écoulement incompressible mono-espèce	25
3.1.1 Espace physique	25
3.1.2 Espace spectral	25
3.2 Écoulement compressible mono-espèce	26
3.3 Écoulement compressible bi-espèces	27

Chapitre 4 Modélisation sous-maille	29
4.1 Test <i>a priori</i>	30
4.2 Fermeture explicite	30
4.2.1 Écoulement incompressible	30
4.2.2 Écoulement compressible mono-espèce	32
4.2.3 Écoulement compressible bi-espèces	33
4.3 Fermeture implicite	34

Partie II Outils numériques	37
------------------------------------	-----------

Chapitre 5 Erreurs numériques	39
5.1 Généralités	39
5.1.1 Notations	40
5.1.2 Troncature et nombre d'onde modifié	40
5.1.3 Aliasing	41
5.2 Termes non linéaires et dérivation	42
5.2.1 Forme divergente	42
5.2.2 Forme convective	44
5.2.3 Tests dynamiques	45
5.3 Validation physique	47
5.3.1 Équations de Navier-Stokes	47
5.3.2 Résolution numérique	47
5.3.3 Résultats	48
5.4 Réduction des erreurs	48

5.4.1	Filtrage	49
5.4.2	Interpolation	50
5.4.3	Comparaison	54
5.5	Erreur numérique et modèle sous-maille	58
5.5.1	Bases de l'étude	58
5.5.2	Équations de Navier-Stokes	59
5.5.3	Analyse terme à terme	62
5.5.4	Étude dynamique 3D	65
5.6	Conclusion	68
Chapitre 6 Le code COMPACT		69
6.1	Formulation mathématique	69
6.1.1	Équations	69
6.1.2	Conditions aux limites	71
6.1.3	Algorithmes	72
6.2	Implémentation	73
6.2.1	Arbre programmatique	73
6.2.2	Optimisation	73
Chapitre 7 Le code WENO		77
7.1	Formulation mathématique	77
7.1.1	Pouvoir de résolution	77
7.1.2	Équations	81
7.1.3	Conditions aux limites	82
7.1.4	Algorithmes	83
7.2	Implémentation	84
7.2.1	Arbre programmatique	84
7.2.2	Optimisation	86
Chapitre 8 Comparaison et validation des codes		91
8.1	Tests linéaires 1D	91
8.1.1	Convection d'un mode	92
8.1.2	Convection d'un gradient	94
8.2	Tests non linéaires 1D	95
8.2.1	Burgers	95
8.2.2	Tube à choc	96
8.3	Couche de mélange plane	97
8.3.1	Mono-espèce	97

8.3.2	Bi-espèces	99
8.4	Synthèse	112
Chapitre 9 Coefficients de transport		113
9.1	Formulations	113
9.1.1	Relations empiriques	113
9.1.2	Approximations usuelles	115
9.2	Comparaisons	116
9.2.1	Tests 1D	116
9.2.2	Tests 2D	122

Partie III	La couche de mélange bi-espèce	125
-------------------	---------------------------------------	------------

Chapitre 10 Conditions initiales		127
10.1	Formulation en tangente hyperbolique	128
10.1.1	Principe de base	128
10.1.2	Ondes de pression	128
10.2	Similitude temporelle	130
10.2.1	Hypothèses de base	131
10.2.2	Équations du problème	131
10.2.3	Solution auto-semblable	133
10.2.4	Conditions aux limites	134
10.2.5	Résolution numérique	134
10.2.6	Résultats	136
10.2.7	Ondes de pression	142
10.3	Perturbation	142
Chapitre 11 Stabilité linéaire		143
11.1	Généralités	143
11.2	Formulation bi-espèces	146
11.2.1	Équations aux perturbations	146
11.2.2	Conditions aux limites et procédure de résolution	147

11.3 Résultats	149
11.3.1 Influence du rapport de densité en 2D	149
11.3.2 Détail des solutions doubles	151
11.3.3 Apparition de modes obliques	154
11.4 Comparaison à la SND	154
11.4.1 Méthodologie	154
11.4.2 Influence du nombre de Reynolds	156
11.4.3 Effets thermiques	156
11.4.4 Vitesse de phase	156
11.5 Synthèse	157
Chapitre 12 Tests a priori	161
12.1 Méthodologie	161
12.1.1 Simulation numérique directe	161
12.1.2 Statistiques	162
12.2 Couple N_2/O_2	163
12.2.1 Paramètres	163
12.2.2 Champs instantanés	164
12.2.3 Statistiques	166
12.2.4 Termes sous-maille	168
12.2.5 Synthèse	174
12.3 Couple H_2/O_2	175
12.3.1 Paramètres	175
12.3.2 Champs instantanés	175
12.3.3 Statistiques	177
12.3.4 Termes sous-maille	179
12.3.5 Synthèse	182
12.4 Synthèse	184
Conclusion générale	185
<hr/>	
Annexes	187
Annexe A Paramètres thermodynamiques	189
Annexe B La méthode WENO	191
B.1 Reconstruction et approximation 1D	191
B.1.1 Reconstruction par valeur moyenne	192

B.1.2	Approximation conservative de la dérivée	192
B.1.3	Approximation WENO	193
B.2	Lois de conservation	193
B.2.1	Flux scalaire	194
B.2.2	Flux vectoriel	194
Annexe C	Cluster Beowulf	197
C.1	Historique	197
C.2	Philosophie	197
C.3	Le cluster EPEE	197
Annexe D	Similitude spatiale	199
D.1	Configuration et paramètres	199
D.2	Principe d'affinité	200
D.3	Conditions aux limites	202
D.4	Résolution numérique	202
D.5	Résultats	203
Annexe E	Termes sous-maille	207
Annexe F	Vers le MILES	231
F.1	Interaction de jets	231
F.2	Interaction choc/jet	241
Table des figures		247
Bibliographie		253

Introduction générale

Mélange : d'après [89] ce terme désigne un *ensemble résultant de l'union de choses différentes*. L'action de mélanger conduit ainsi à la combinaison des propriétés des objets mélangés dont le résultat pourra en posséder les caractéristiques. Cette notion universelle intervient aussi bien au niveau social (mélange culturel), biologique (mélange chromosomique), qu'industriel.

D'un point de vue industriel, de nombreuses applications de combustion dépendent de la qualité du mélange comburant/combustible. Ceci est principalement le cas pour les études actuelles [104][68] liées à la propulsion hypersonique en atmosphère où les moteurs devront opérer en mode supersonique (SCRAMJET).

En pratique, les propriétés d'instabilité (de type Kelvin-Helmholtz) des écoulements cisailés sont utilisées pour initier le mélange. La couche de mélange (fig. 1), prototype même de l'écoulement cisailé libre, a fait l'objet de nombreuses recherches théoriques, expérimentales et numériques depuis près d'un demi-siècle. Brown & Roshko [13] ont identifié la présence de structures cohérentes bidimensionnelles puis tridimensionnelles ayant un rôle d'entraînement important et une action de mélange lors des coalescences tourbillonnaires [22].

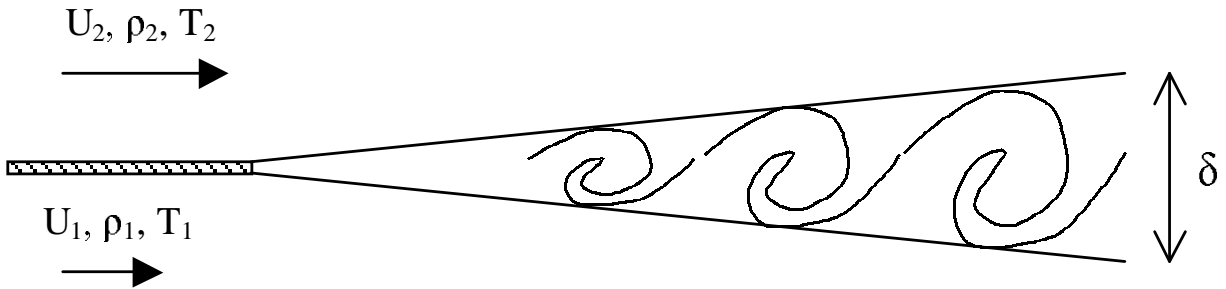


FIG. 1 – Représentation schématique d'une couche de mélange spatiale

En écoulement incompressible, la couche de mélange spatiale est caractérisée par une épaisseur (δ) fonction linéaire de la distance au bord de la plaque séparatrice et indépendante du temps [23]. À mesure que l'écoulement devient compressible, les expériences et simulations numériques montrent une réduction de l'ouverture de la zone de mélange. L'introduction du nombre de Mach convectif [10] [79], même si ce paramètre n'est pas suffisant pour prendre en compte tous les effets liés à la compressibilité [23], permet de concentrer grossièrement les résultats de différents auteurs sur un même graphique (fig. 2).

$$M_c = \max \{M_{c1}; M_{c2}\} \quad \text{avec} \quad M_{c1} = \frac{|U_1 - U_c|}{a_1} \quad M_{c2} = \frac{|U_2 - U_c|}{a_2}$$

où

$$U_c = \frac{a_2 U_1 + a_1 U_2}{a_1 + a_2} \quad (1)$$

est la vitesse de convection des grosses structures et a_i la vitesse du son dans le fluide i .

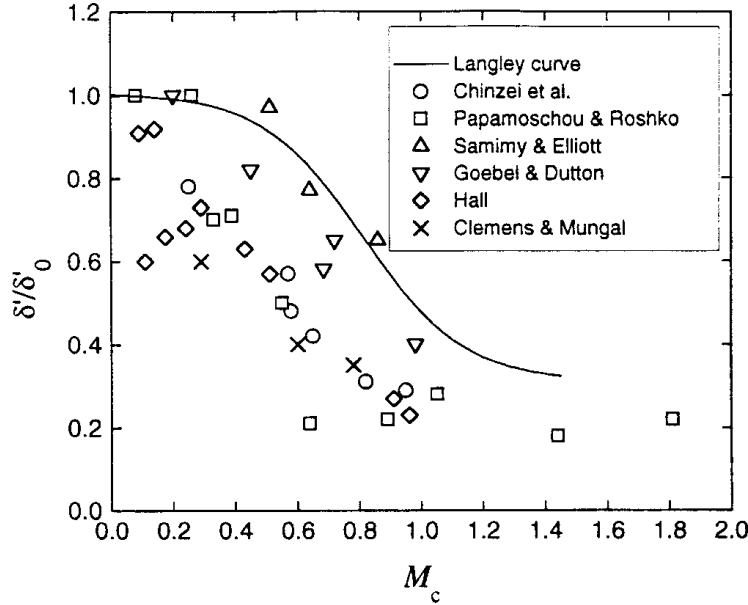


FIG. 2 – Épaisseur normalisée de la couche de mélange compressible en fonction du nombre de Mach convectif d'après [57]

Cette réduction est également prédite par la théorie linéaire de la stabilité [8], mais pas le palier observé au-delà de $M_c = 1$. Expérimentalement Samimy & Elliot [91] constatent que le niveau de turbulence diminue lorsque M_c augmente et qu'il est très difficile d'observer des structures cohérentes au-delà de $M_c = 0.6$. Numériquement, Sandham & Reynolds [93] montrent que l'écoulement est préférablement tridimensionnel au-delà de ce nombre de Mach. De plus, la vitesse de convection prédite par la relation isentropique (1) est différente de celle mesurée lorsque $M_c > 0.5$ [57]. Dimotakis [23] suppose que la présence de zones supersoniques locales et de chocs générés par les structures cohérentes (eddy-shocklets) modifient les vitesses convectives et conduit à un entraînement asymétrique.

L'effet de densité sur le taux d'évasement est également notable. Les expériences de Brown & Roshko [13] montrent une forte variation de δ avec le rapport de densité (fig. 3). Dans le cas probable d'utilisation d'hydrogène pour le SCRAMJET on a à effectuer le mélange d'un gaz léger dans un environnement lourd (air) qui se traduit par une nouvelle réduction de l'entraînement de la couche de mélange.

Ces difficultés de mélange ont conduit de nombreux auteurs à s'intéresser aux possibilités de contrôle de la couche de cisaillement. Ce contrôle peut être passif, et lié à des modifications géométriques en jouant par exemple sur la forme de la buse d'un jet [52], ou actif comme le forçage acoustique [40].

En écoulement compressible les interactions de jets [51] et choc/couche de mélange ont été largement envisagées [40]. Ces méthodes ont pu se montrer efficaces bien qu'il semble que sous

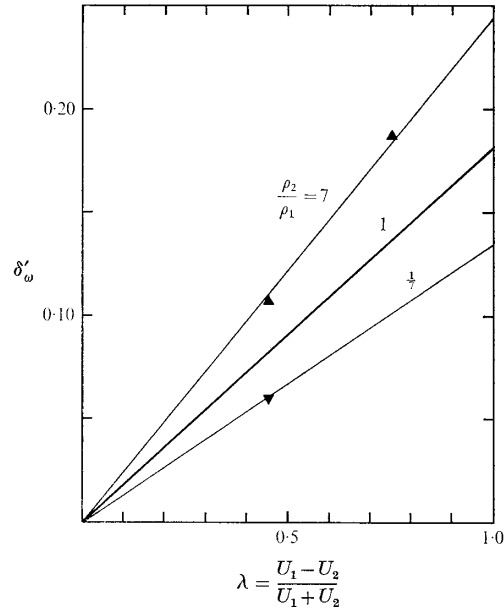


FIG. 3 – Effet du rapport de densité sur l'évasement de la couche de mélange d'après [13].

certaines conditions l'interaction choc/turbulence ne conduise pas forcément à une augmentation des fluctuations de vitesse [3]. Une fois le mélange effectué, la stabilisation de la flamme passe par la compréhension fine des mécanismes instationnaires mis en jeu (e.g. battement de jets, interaction choc/tourbillons).

D'un point de vue numérique, l'extrême complexité de la physique considérée (même hors combustion) nécessite la prise en compte de phénomènes instationnaires et tridimensionnels liés au mélange compressible d'espèces à masse volumique fortement variable. Ces contraintes écartent les approches statistiques classiques (de type Reynolds Averaged Navier-Stokes) et conduisent naturellement à considérer la méthode de Simulation des Grandes Échelles détaillée dans la première partie de ce mémoire. Le manque d'information sur les modèles de fermeture compressibles multi-espèces a orienté nos activités vers l'étude fine des contributions sous-maille issues des équations filtrées. La seconde partie détaille les méthodes numériques retenues pour les simulations. Les conditions initiales du calcul de couches de mélanges compressibles bi-espèce ont fait l'objet de développements théoriques présentés en troisième partie. Enfin, l'évaluation relative de la contribution sous-maille des différents termes à modéliser est effectuée de manière paramétrique pour les couples N_2/O_2 et H_2/O_2 .

Première partie

Simulation des grandes échelles

Chapitre 1

Concepts de base

1.1 Généralités

Depuis près d'un demi-siècle, la révolution numérique qui inonde notre société a permis à la Science de poser un nouveau regard sur des problèmes physiques aussi bien fondamentaux que techniques. Ce troisième oeil est lié aux progrès constants de l'outil informatique et complète les approches classiques : analytique et expérimentale.

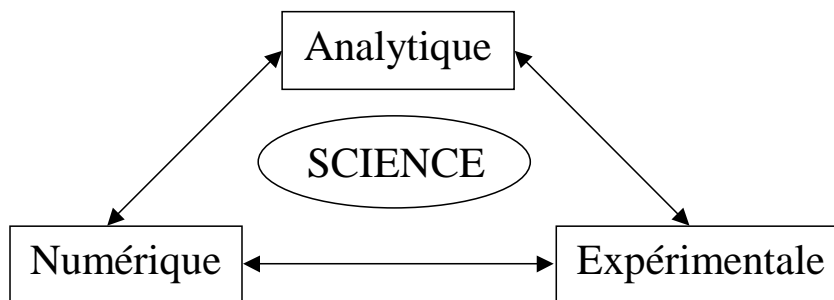


FIG. 1.1 – Approches scientifiques classiques

Les doubles flèches de la figure (1.1) traduisent les interactions entre ces différents pôles. Le calcul numérique nécessite l'utilisation d'algorithmes appropriés issus de travaux d'analyse numérique et en contre partie les résultats de ces calculs permettent de mieux comprendre certaines interactions physiques et ainsi d'améliorer les modèles. De même, une simulation numérique requiert l'emploi de données expérimentales pour "caler" le modèle mathématique sur la physique du processus, la simulation devenant alors une véritable expérience numérique où toutes les grandeurs sont calculables.

La CFD, ou mécanique des fluides numérique, regroupe sous ce terme générique des problèmes allant du calcul de l'écoulement potentiel autour d'un corps [45] à la simulation paramétrique d'une chambre de combustion [67]. Ces problèmes ont pour base commune les équations de Navier-Stokes mais leurs hypothèses physiques et géométriques propres conduisent à une complexité plus ou moins grande du modèle mathématique à résoudre. Dans ce mémoire, principalement axé sur les aspects numériques, nous ne considérons que les problèmes classiques de la turbulence : turbulence homogène et isotrope, transition à la turbulence dans les écoulements

cisaillés libres, et dans une moindre mesure le cas des jets impactants et de l'interaction choc/jet.

La caractéristique principale d'un écoulement turbulent est la présence d'une large gamme d'échelles spatio-temporelles [58] intervenant dans le processus de cascade énergétique représenté en figure (1.2). Schématiquement, les grosses structures fournissent de l'énergie aux tourbillons de taille inférieure qui fournissent eux-même de l'énergie aux plus petits jusqu'à ce que celle-ci soit dissipée en chaleur par la viscosité du fluide [88].

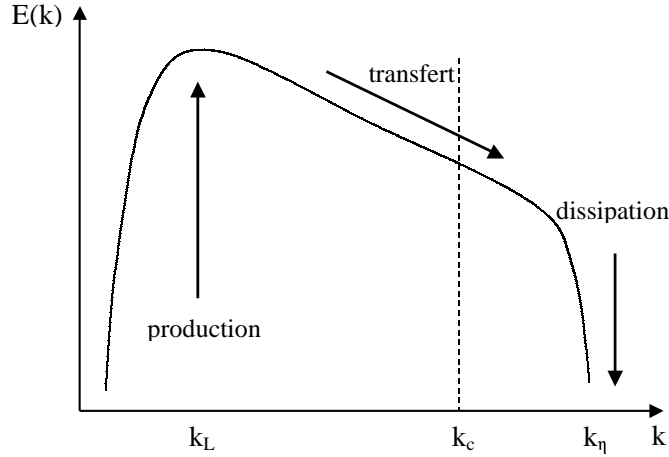


FIG. 1.2 – Représentation schématique du spectre d'énergie d'une turbulence homogène et isotrope.

L'approche naturelle pour résoudre un problème de turbulence consiste à calculer directement l'évolution des structures de l'écoulement à partir de conditions initiales adaptées. C'est la simulation numérique directe (SND). Cette méthode, forcément instationnaire, nécessite un maillage en espace suffisamment fin pour atteindre les échelles dissipatives (k_η) et l'emploi de méthodes extrêmement précises afin de limiter le rôle de la diffusion numérique. En se rappelant que le rapport entre les échelles énergétique (k_L) et dissipatives (k_η) est proportionnel au nombre de Reynolds (Re) construit sur les échelles énergétiques de l'écoulement [58] :

$$\frac{L}{\eta} = O\left(Re^{3/4}\right)$$

on se trouve limité en pratique à des études à faible nombre de Reynolds, de l'ordre de la centaine. Cette valeur est malheureusement bien éloignée des ordres de grandeur rencontrés en configuration industrielle ($\approx 10^5$ à 10^8). Malgré ces limitations, la SND est un outil unique pour l'étude fondamentale des problèmes de turbulence. Elle permet une description fine des "mécanismes physiques de base qui régissent la dynamique des fluides, en vue de leur compréhension, de leur modélisation et ultérieurement de leur contrôle" (Sagaut [90]).

L'approche statistique [73] est le moyen le plus couramment employé pour s'affranchir des limitations de la SND. Elle est applicable en géométrie complexe et permet une augmentation du nombre de Reynolds, au détriment d'une perte d'information au niveau des champs simulés. Un opérateur de moyenne (souvent temporelle ou spatiale sous hypothèse d'ergodicité),

$$\langle u(x) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T u(x, t) dt$$

est appliqué aux équations de Navier-Stokes (approche RANS ou Reynolds Averaged Navier-Stokes) et permet ainsi de ne calculer que le champ moyen. Ce champ est néanmoins relié physiquement à toutes les autres échelles présentes dans l'écoulement dont l'influence est prise en compte par l'introduction d'un modèle statistique. En pratique ces modèles ont une portabilité très limitée et doivent être ajustés au cas par cas [41].

La simulation des grandes échelles (SGE) se situe entre les deux approches précédentes. Partant du principe que le mécanisme de transfert énergétique est universel au niveau de la zone inertielle quel que soit le type d'écoulement considéré, plutôt que de moyenner les équations on va ici appliquer un filtre spatial. Ce filtre, passe-bas en fréquence, réduit le nombre de degrés de liberté du système par rapport à la SND et autorise une résolution beaucoup plus détaillée des champs qu'en RANS. Là encore, du fait de la non-linéarité des équations de Navier-Stokes un modèle de turbulence, dit modèle de sous-maille, est nécessaire pour fermer le système.

L'objet de cette première partie est d'introduire le formalisme de la SGE pour le cas d'un mélange binaire de fluides compressibles et de présenter les moyens de résolution associés.

1.2 Équations de bilan

Dans cette section on exprime les équations de conservation (masse, quantité de mouvement, énergie) par unité de volume qui seront étudiées dans la suite. Ces équations sont établies en allant du cas général vers le particulier. Les variables principales sont :

- ρ la densité,
- u_i *i*ème composante de la vitesse,
- ρe_t l'énergie totale par unité de volume,
- Y_α fraction massique de l'espèce α .

1.2.1 Écoulement compressible multi-espèces

Les équations régissant l'évolution du mélange de N espèces gazeuses sont rappelées par Poinot et Veynante [82] en coordonnées cartésiennes orthonormales.

Loi d'état

En supposant que le mélange de N gaz parfaits est lui même parfait, la loi de Dalton donne pour la pression :

$$p = \rho r T$$

où T est la température, et r le barycentre des constantes massiques des gaz :

$$r = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha r_\alpha \quad ; \quad \text{avec} \quad r_\alpha = \frac{R}{W_\alpha}$$

$R = 8.314 \text{ J}/(\text{mole K})$ est la constante universelle des gaz parfaits, et W_α la masse molaire de l'espèce α .

Masse

La conservation de la masse totale du système impose :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0$$

et pour l'espèce α :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho (u_j + V_{\alpha,j}) Y_\alpha) = 0$$

$V_{\alpha,j}$ est la $j^{\text{ème}}$ composante de la vitesse de diffusion V_α de l'espèce α . Classiquement, en négligeant l'effet Soret, cette expression est approchée par la loi de Fick :

$$V_{\alpha,j} Y_\alpha = -D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}$$

ou pour le flux de diffusion :

$$J_{\alpha j} = \rho V_{\alpha,j} Y_\alpha = -\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}$$

D_α étant le coefficient de diffusion de l'espèce α dans le mélange.

Quantité de mouvement

En l'absence de force extérieure l'équation de quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$$

Pour un fluide newtonien, le tenseur des contraintes visqueuses, σ_{ij} , est défini sous l'hypothèse de Stokes par :

$$\sigma_{ij} = \mu \left[-\frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]$$

μ représentant la viscosité dynamique.

Énergie

Plusieurs écritures sont possibles pour cette équation. Trois sont classiquement utilisées :

- énergie totale
- énergie interne
- enthalpie

En négligeant la contribution de l'effet Dufour [62], la conservation de l'énergie totale s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e_t u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} u_j)$$

où le flux d'énergie :

$$q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^N h_\alpha J_{\alpha j}$$

incorpore uniquement les termes de Fourier (k : coefficient de Fourier) et de diffusion enthalpique. L'enthalpie de l'espèce α étant définie par :

$$h_\alpha = \int_{T_0}^T C_{p\alpha} dT + \Delta h_\alpha^0 \quad (1.1)$$

où Δh_α^0 est l'enthalpie de formation de l'espèce α (nulle pour un corps pur) à la température de référence T_0 (généralement prise à $298.15K$). $C_{p\alpha}$ est la chaleur massique à pression constante.

On obtient l'équation de l'énergie interne (e) grâce à la relation :

$$e_t = e + \frac{1}{2} u_i u_i$$

Soit,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e u_j) + p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

Et sous la forme enthalpique statique :

$$h = e + \frac{p}{\rho}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

1.2.2 Mélange binaire

Dans ce mémoire nous avons restreint les études multi-espèces au cas binaire, c'est-à-dire au mélange de deux gaz uniquement. Cette hypothèse permet de réduire le système d'équations tout en gardant la physique du mélange. La principale simplification intervient au niveau de la conservation de la masse où il n'est pas nécessaire d'utiliser de vitesse de correction [82] puisque $D_1 = D_2 = D$. La relation $Y = Y_1 = 1 - Y_2$ impose également :

$$J_j = J_{1j} = -J_{2j} = -\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_j}$$

Forme conservative

S'il y a lieu de considérer d'éventuelles discontinuités de l'écoulement, la formulation conservative des équations est nécessaire [35]. Le système final d'équations sous forme conservative faible est alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho e_t u_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (p u_j) = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) \quad (1.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y u_j) = -\frac{\partial J_j}{\partial x_j} \quad (1.5)$$

avec

$$q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j} + (h_1 - h_2) J_j \quad (1.6)$$

$$p = \rho (r_2 + (r_1 - r_2) Y) T \quad (1.7)$$

Forme convective-primitive

En l'absence de choc, l'écriture du système précédent (1.2)–(1.5) en terme des variables primitives $[\rho, u_i, T, Y]$ permet une réduction du nombre d'opérations. Sous la forme convective-primitive, on a :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1.8)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \rho C_v \left[\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} &= \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) - (C_{p1} - C_{p2}) J_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \\ &\quad - (r_1 - r_2) T \frac{\partial J_j}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\rho \left[\frac{\partial Y}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial J_j}{\partial x_j} \quad (1.11)$$

où $C_v = C_{p2} + (C_{p1} - C_{p2})Y - r$

1.2.3 Écoulement compressible mono-espèce

Si on suppose que l'écoulement est constitué d'un seul fluide, le système d'équation à résoudre se simplifie. Il suffit de poser $Y = cste$ dans (1.2)–(1.4) où le flux de chaleur est remplacé par :

$$q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (1.12)$$

et la loi d'état par :

$$p = \rho r T \quad ; \quad \text{avec} \quad r = \frac{R}{W} \quad (1.13)$$

1.2.4 Écoulement incompressible mono-espèce

Si maintenant on effectue l'hypothèse supplémentaire que l'écoulement est incompressible, le système précédent se simplifie encore. En supposant également que la viscosité est constante, l'équation de l'énergie est découplée de la dynamique. Ce nouveau système est exprimé d'abord dans l'espace physique puis dans l'espace spectral.

Espace physique

Dans l'espace physique il faut maintenant résoudre :

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} = \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right\} \quad (1.15)$$

Espace spectral

En considérant que toutes les directions sont homogènes, le système (1.14)–(1.15) est écrit de manière équivalente dans l'espace de Fourier. Pour cela on introduit la transformée de Fourier continue et sa réciproque :

$$\widehat{f}(\vec{k}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int f(\vec{x}, t) e^{-j_c \vec{k} \cdot \vec{x}} d\vec{x} \quad (1.16)$$

$$f(\vec{x}, t) = \int \widehat{f}(\vec{k}, t) e^{j_c \vec{k} \cdot \vec{x}} d\vec{k} \quad (1.17)$$

avec $j_c^2 = -1$.

Dans l'espace spectral, l'équation de continuité (1.14) devient :

$$k_i \widehat{u}_i = 0 \quad (1.18)$$

et l'équation de quantité de mouvement (1.15) :

$$\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial t} + j_c k_j (\widehat{u}_i * \widehat{u}_j) + j_c k_i \widehat{P} = -\nu k^2 \widehat{u}_i \quad (1.19)$$

où $P = p/\rho$ et $k^2 = k_i k_i$, le produit de convolution étant défini tel que :

$$(\widehat{u}_i * \widehat{u}_j)(\vec{k}, t) = \int_{\vec{p} + \vec{q} = \vec{k}} \widehat{u}_i(\vec{p}, t) \widehat{u}_j(\vec{q}, t) d\vec{p} \quad (1.20)$$

La projection de (1.19) sur le plan perpendiculaire à \vec{k} donne :

$$\widehat{P} = -\frac{k_l k_j}{k^2} (\widehat{u}_l * \widehat{u}_j)$$

En introduisant le projecteur,

$$P_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (1.21)$$

on a au final :

$$\frac{\partial \widehat{u}_i}{\partial t} + \nu k^2 \widehat{u}_i = t_i(\vec{k}, t) \quad (1.22)$$

avec

$$t_i(\vec{k}, t) = -j_c k_j P_{il}(\vec{k}) (\widehat{u}_l * \widehat{u}_j)(\vec{k}, t)$$

Chapitre 2

Filtrage

En Simulation des Grandes Échelles, toute variable ϕ de l'écoulement est décomposée en la somme des contributions des grandes échelles $\bar{\phi}$ et des petites échelles ϕ' :

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'$$

Cette séparation d'échelles fait appel à un opérateur de filtrage, noté $\bar{\cdot}$, caractérisé d'abord d'un point de vue continu puis discret dans ce chapitre.

2.1 Filtrage continu

Dans cette section générale, basée sur l'ouvrage de P. Sagaut [90], on ne considère que le filtrage spatial.

2.1.1 Filtrage homogène

Le filtre utilisé pour la séparation d'échelles est classiquement défini dans le cas homogène et isotrope, c'est-à-dire que les propriétés de celui-ci sont identiques en chaque point d'espace et indépendantes de la direction considérée.

Définition

La partie filtrée $\bar{\phi}(\vec{x})$ est obtenue par convolution du noyau du filtre (G) et du champ instantané ϕ sur le domaine Ω :

$$\bar{\phi}(\vec{x}) = \int_{\Omega} \phi(\vec{\xi}) G(\vec{x} - \vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad (2.1)$$

Dans l'espace spectral la convolution est remplacée par le produit des spectres :

$$\bar{\phi}(\vec{k}) = \hat{\phi}(\vec{k}) \hat{G}(\vec{k})$$

Propriétés

Afin d'être facilement manipulable, le filtre doit vérifier les propriétés suivantes :

– *Conservation des constantes*

$$\bar{a} = a \iff \int_{\Omega} G(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = 1$$

– Linéarité

$$\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi}$$

– Commutativité avec la dérivation

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial x}} = \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x}$$

De plus, le filtre sera dit positif si son noyau est positif [112], soit en 1D :

$$G(x) \geq 0 \quad \forall x$$

Exemples

Deux filtres mono-dimensionnels classiques sont présentés en figure (2.1). Il s'agit du filtre boîte et du filtre porte :

– Le filtre boîte, local en espace, impose la taille maximale des structures résolues

$$G(x - \xi) = \begin{cases} \frac{1}{\overline{\Delta}} & \text{si } |x - \xi| \leq \frac{\overline{\Delta}}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.2)$$

$$\widehat{G}(k) = \frac{\sin(k\overline{\Delta}/2)}{k\overline{\Delta}/2}$$

– Le filtre porte, local dans l'espace de Fourier, impose la fréquence maximale du spectre des structures résolues

$$G(x - \xi) = \frac{\sin(k_c(x - \xi))}{k_c(x - \xi)}, \quad \text{avec } k_c = \frac{\pi}{\overline{\Delta}}$$

$$\widehat{G}(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } |k| \leq k_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.3)$$

2.1.2 Filtrage non homogène

En pratique on ne peut pas toujours se ramener aux situations homogènes ou isotropes. La présence de parois, par exemple, nécessite de revoir et d'étendre la définition du filtrage.

Filtres SOCF

De nombreux travaux existent sur le problème de filtrage [90] [66], nous ne présenterons ici que les résultats de Ghosal [34] utiles pour la suite de ce mémoire.

Ces auteurs proposent de définir le filtrage *homogène* d'une variable $\phi(\xi)$, définie sur $]-\infty; +\infty[$, comme :

$$\overline{\phi}(\xi) = \frac{1}{\overline{\Delta}} \int_{-\infty}^{+\infty} G\left(\frac{\xi - \eta}{\overline{\Delta}}\right) \phi(\eta) d\eta \quad (2.4)$$

où $\overline{\Delta}$ est la longueur de coupure constante. On attend de plus que le noyau de convolution G vérifie les propriétés suivantes :

– Symétrie

$$G(\xi) = G(-\xi)$$

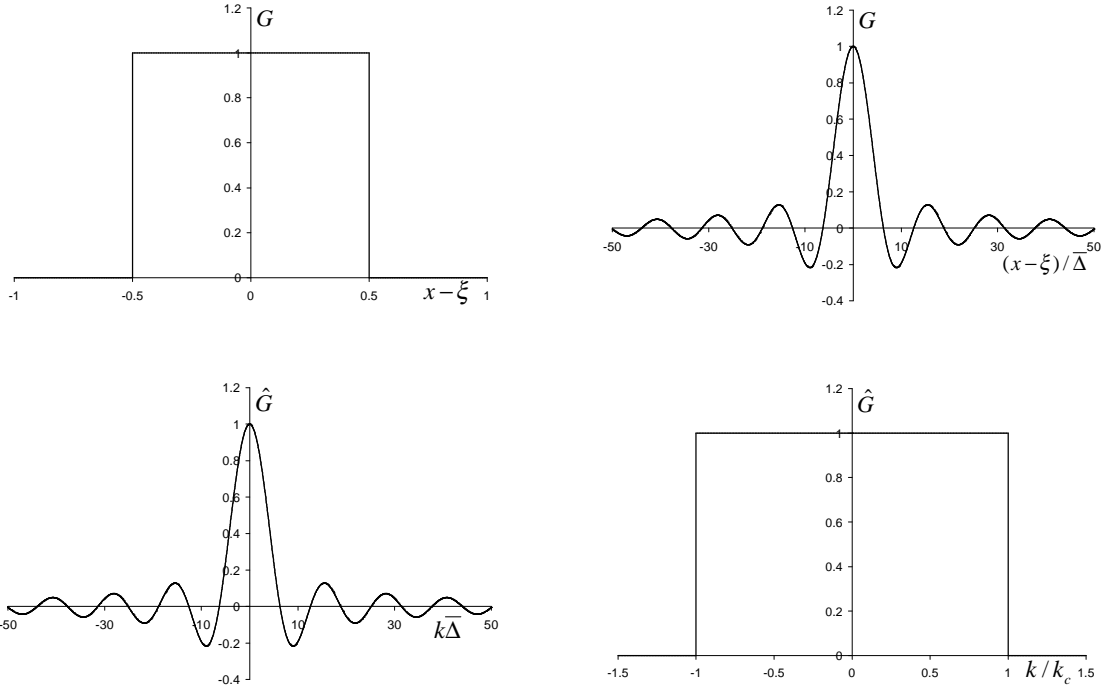


FIG. 2.1 – Noyaux des filtres boîte (gauche) et porte (droite) dans l'espace physique (haut) et spectral (bas)

- *Conservation des constantes*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi) d\xi = 1$$

- *Décroissance rapide*

$G(\xi) \rightarrow 0$ quand $|\xi| \rightarrow \infty$ suffisamment rapidement pour que tous ses moments soient finis

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G(\xi) \xi^n d\xi < \infty, \quad \forall n \geq 0$$

- *Quasi-localité dans l'espace physique*

$G(\xi)$ est localisé dans l'intervalle $[-1/2; 1/2]$

L'extension au cas inhomogène est réalisée en introduisant un changement de variable bijectif pour se ramener au cas homogène (2.4). Si ϕ est définie sur $[a; b]$, on relie cet intervalle à $[-\infty; +\infty]$ via la fonction f strictement monotone et différentiable (fig. 2.2), telle que :

$$f(a) = -\infty, \quad f(b) = +\infty$$

Pour filtrer la fonction $\psi(x)$ on passe sur le domaine infini grâce à $x = f^{-1}(\xi)$, soit :

$$\psi(x) = \psi(f^{-1}(\xi)) = \phi(\xi)$$

On peut alors utiliser directement l'expression (2.4) ou repasser dans l'espace physique :

$$\bar{\psi}(x) = \frac{1}{\Delta} \int_a^b G\left(\frac{f(x) - f(y)}{\Delta}\right) \psi(y) f'(y) dy$$

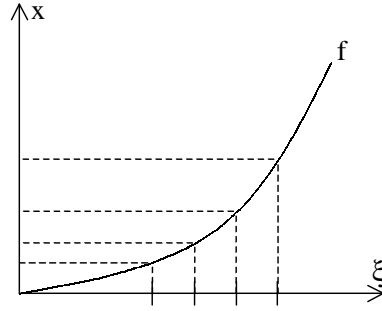


FIG. 2.2 – Changement de variables pour le filtrage inhomogène

Le filtrage ainsi construit ne commute plus avec la dérivation spatiale et introduit une erreur en $o(\overline{\Delta}^2)$, d'où le nom de filtre SOCF (Second Order Commuting Filter) :

$$\overline{\frac{d\phi}{d\xi}} - \frac{d\overline{\phi}}{d\xi} = o(\overline{\Delta}^2)$$

2.1.3 Extension au cas compressible

En écoulement compressible, où la masse volumique est autorisée à varier, il est courant d'introduire un filtrage pondéré par la masse [29] afin d'éviter l'apparition de termes supplémentaires dans l'équation de continuité. Ce nouveau filtrage fait intervenir les variables de Favre définies comme :

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \quad (2.5)$$

Ainsi, une variable est décomposée comme pour le cas incompressible en :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi''$$

La différence avec le filtrage incompressible est que cette fois l'opérateur compressible ne commute plus avec la dérivation (qu'elle soit spatiale ou temporelle).

2.2 Filtrage discret

Si le filtrage continu est un sujet bien développé dans la littérature, le passage à la formulation discrète est un peu moins avancé [76]. En pratique, deux approches sont envisageables. La première consiste à choisir un filtre continu suffisamment simple pour calculer explicitement l'intégrale de convolution (2.1). Cette extension directe (continu \rightarrow discret) peut poser au moins deux problèmes en pratique :

- un problème de coût : le produit de convolution revenant à effectuer un calcul matrice-vecteur pour chaque point d'espace et chaque direction,
- un problème numérique : le filtre discret ne respectant pas forcément les propriétés de son modèle continu (conservation des constantes par exemple).

La seconde approche est de partir directement d'un filtre discret :

$$\overline{\phi}_i = \overline{\phi}(x_i) = \sum_{l=-N}^N a_l \phi_{i+l} \quad (2.6)$$

et d'évaluer numériquement les poids des différents voisins du noeud considéré. Lele [56] a ainsi défini une classe de filtres compacts à haut pouvoir de résolution où les coefficients sont évalués en fixant l'ordre du filtre et certaines valeurs de collocation. Guerts [39] choisit de calculer les coefficients du filtre en annulant les termes d'ordre supérieur issus du développement en série Taylor de la fonction de transfert.

On présente dans cette section les résultats de la première approche dans le cas d'un filtre boîte et ceux de la seconde où on a choisi de formuler les coefficients par identification avec les moments d'un filtre continu.

2.2.1 Filtre discret homogène

On suppose ici que le domaine d'étude est mono-dimensionnel, périodique, le pas de filtrage ($\bar{\Delta}$) est constant et multiple de la maille (Δ) : $\bar{\Delta} = K\Delta$.

Du continu au discret

Pour que le calcul de l'intégrale de convolution (2.1) soit facilement réalisable, il convient d'utiliser un filtre local en espace. Le plus simple est le filtre boîte (2.2) car il permet d'assurer la conservation numérique des constantes. Ainsi, (2.1) devient :

$$\bar{\phi}(x) = \frac{1}{\bar{\Delta}} \int_{x-\bar{\Delta}/2}^{x+\bar{\Delta}/2} \phi(\xi) d\xi$$

Si K est pair, $K = 2\alpha$:

$$\bar{\phi}(x) = \frac{1}{\Delta} \int_{x-\alpha\Delta}^{x+\alpha\Delta} \phi(\xi) d\xi$$

Soit, après intégration par la méthode des trapèzes :

$$\bar{\phi}_i = \frac{1}{4\alpha} \left[\phi_{i-\alpha} + 2 \sum_{j=-\alpha+1}^{\alpha-1} \phi_{i+j} + \phi_{i+\alpha} \right] \quad (2.7)$$

La fonction de transfert associée :

$$\hat{G}(\omega) = \frac{1}{2\alpha} \left[1 + \cos(\alpha\omega) + 2 \sum_{j=1}^{\alpha-1} \cos(j\omega) \right] \quad \omega = k\Delta \in [0; \pi]$$

est tracée en figure (2.3) pour $K = 2$, $K = 4$, et $K = 6$.

Le résultat de l'application des filtres $K = 2$ et $K = 6$ sur une fonction test est présenté en figure (2.4). Ces filtres sont simples d'utilisation (nombre réduit de voisins) et efficaces.

Le cas K impair, inutile pour la suite du mémoire, n'est pas détaillé.

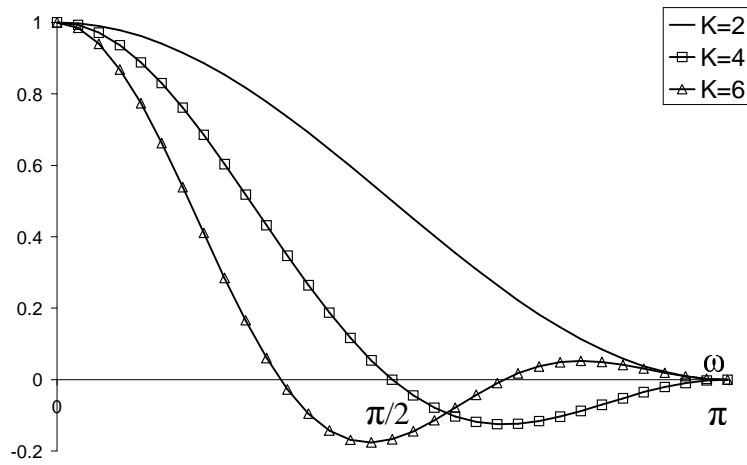


FIG. 2.3 – Fonctions de transfert des filtres boîte discrets pour $\alpha = 1, 2, 3$

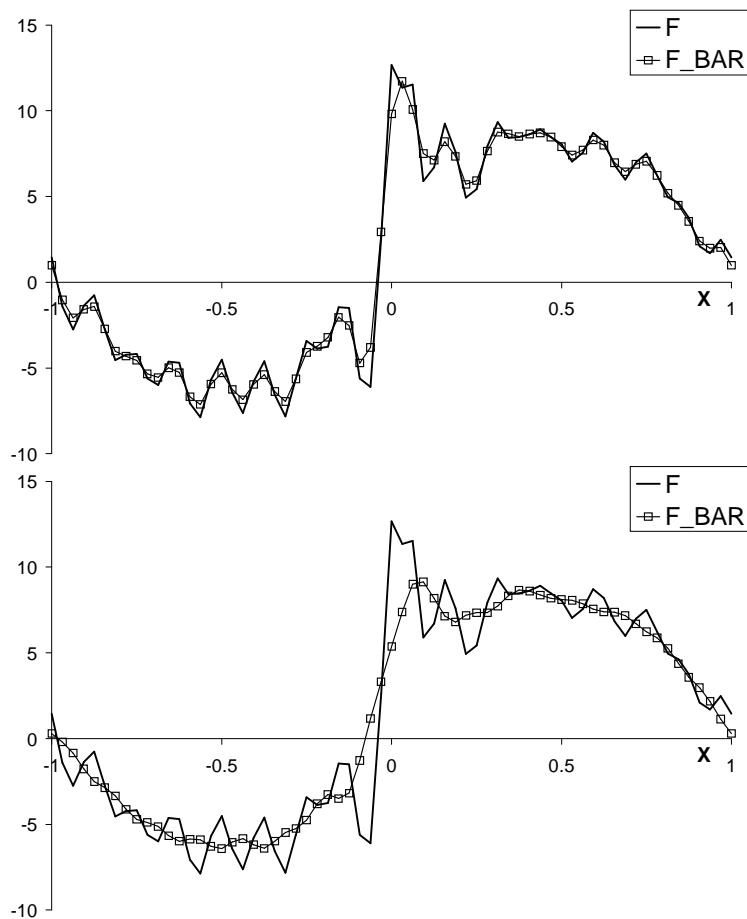


FIG. 2.4 – Effet du filtre boîte discret sur une fonction test pour $K = 2$ (haut) et $K = 6$ (bas)

Du discret au continu

On s'intéresse maintenant à l'approche inverse consistant à partir d'un filtre discret et d'essayer d'y associer un filtre continu.

Dans l'espace de Fourier le mode k de la fonction de transfert discrète du filtre discret (2.6) est défini par :

$$\widehat{\phi}_k = \widehat{H}_k \widehat{\phi}_k$$

Soit,

$$\widehat{H}_k = \sum_{l=-N}^N a_l e^{jl\omega} \quad (2.8)$$

où $j^2 = -1$ et $\omega = k\Delta \in [0; \pi]$. La conservation des constantes impose :

$$\widehat{H}_0 = 1, \quad \text{soit} \quad \sum_{l=-N}^N a_l = 1$$

On impose également au filtre d'écraser les hautes fréquences :

$$\widehat{H}_{\omega=\pi} = 0, \quad \text{soit} \quad \sum_{l=-N}^N a_l e^{jl\pi} = 0$$

A ce stade on dispose de deux relations à compléter par identification au filtre continu d'intérêt. Par exemple, pour un filtre gaussien, le noyau continu est :

$$G(x - \xi) = \left(\frac{\gamma}{\pi \Delta^2} \right)^{1/2} \exp \left(-\gamma \frac{(x - \xi)^2}{\Delta^2} \right)$$

où la constante positive γ (de l'ordre de l'unité généralement) pilote la raideur du filtre. On notera que ce noyau est positif, pair et rapidement décroissant. Ce sont ces propriétés que nous allons utiliser pour obtenir des relations supplémentaires.

La parité impose :

$$a_{-l} = a_l \quad \forall l \neq 0$$

En supposant que le filtre discret possède les mêmes moments d'ordre n que le filtre continu :

$$\mathcal{M}_n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^n G(x - \xi) d\xi$$

on obtient pour le noyau gaussien considéré :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0(x) &= 1 \\ \mathcal{M}_1(x) &= x \\ \mathcal{M}_{n+2}(x) &= x \mathcal{M}_{n+1}(x) + \frac{(n+1)\overline{\Delta}^2}{2\gamma} \mathcal{M}_n(x) \end{aligned} \quad (2.9)$$

A partir du noyau continu associé au filtre discret (2.6) :

$$H(x - \xi) = \sum_{l=-N}^N a_l \delta(x - \xi + l\Delta)$$

les moments discrets d'ordre n s'écrivent :

$$\mathcal{N}_n = \sum_{l=-N}^N a_l (x + l\Delta)^n \quad (2.10)$$

A ce stade la valeur de x intervenant dans (2.9) et (2.10) est arbitraire et on décide de poser $x = 0$ pour simplifier les calculs. Les coefficients a_l obtenus par identification des moments pairs sont donnés en table (2.1) pour N et K variant de 1 à 3.

	K=1	K=2	K=3
N=1	$a_0 = 0.5$ $a_1 = 0.25$		
N=2	$a_0 = 0.593750$ $a_1 = 0.25$ $a_2 = -0.046875$	$a_0 = 0.5$ $a_1 = 0.25$ $a_2 = 0$	
N=3	$a_0 = 0.637370$ $a_1 = 0.239095$ $a_2 = -0.068685$ $a_3 = 0.010905$	$a_0 = 0.5104166$ $a_1 = 0.2473958$ $a_2 = -0.0052081$ $a_3 = 0.0026040$	$a_0 = 0.3769532$ $a_1 = 0.2416992$ $a_2 = 0.0615234$ $a_3 = 0.0083008$

TAB. 2.1 – Coefficient du filtre gaussien discret

Compte tenu de la propriété de parité, la fonction de transfert du filtre discret (2.8) devient :

$$\hat{H}(\omega) = a_0 + 2 \sum_{l=1}^N a_l \cos(l\omega)$$

Ces fonctions de transfert sont représentées en figure (2.5) pour les coefficients donnés en table (2.1). Appliquées dans l'espace physique sur une fonction test, l'atténuation des fréquences élevées est d'autant plus visible que la largeur du filtre (K) est grande (fig. 2.6) tout en restant inférieure au filtre boîte discret précédent (fig. 2.4). Des résultats similaires peuvent être obtenus en choisissant un autre noyau continu.

2.2.2 Filtre discret inhomogène

Domaine infini

L'extension des filtres précédents à la configuration non uniforme est relativement aisée pourvu que l'on puisse se ramener à un domaine mathématique infini. En effet, la définition des filtres SOCF (2.4) revient simplement à filtrer la fonction test aux noeuds du domaine mathématique plutôt que sur le domaine physique, les propriétés supplémentaires imposées au noyau assurant que l'erreur de commutation est d'ordre 2.

Domaine fini

Si le domaine d'étude est borné on se restreint à l'utilisation du filtre boîte. La localisation spatiale de ce filtre permet de l'utiliser tel quel sur l'intérieur du domaine. On peut chercher

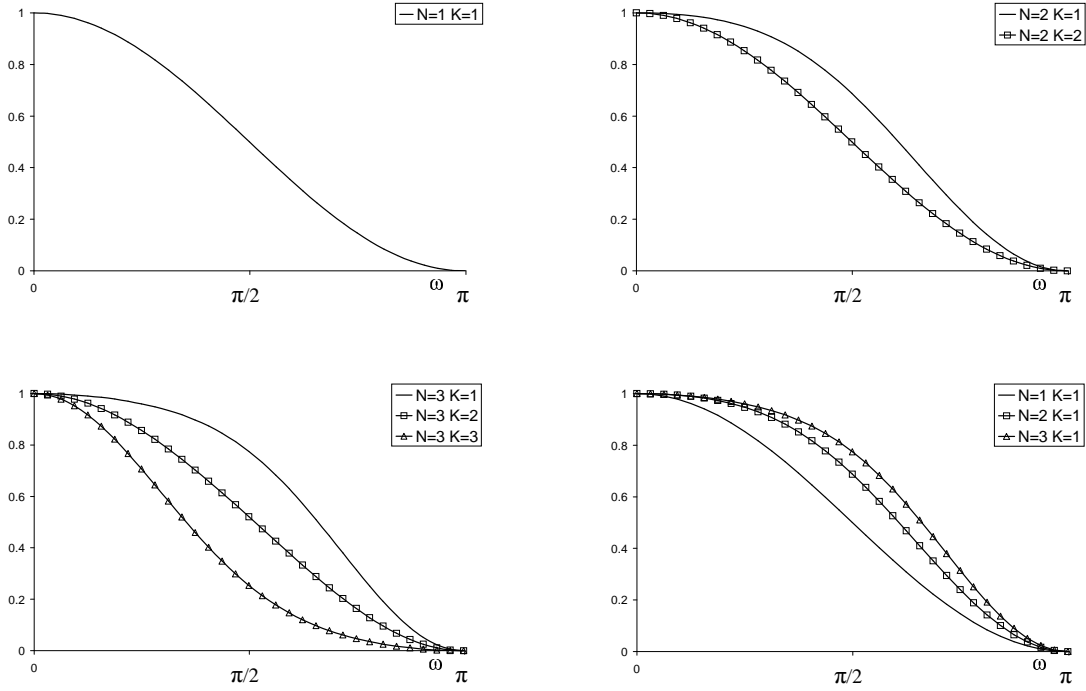


FIG. 2.5 – Fonctions de transfert du filtre discret à moments gaussiens pour $N = 1$ à 3 et $K = 1$ à 3 . Ici $\gamma = 4$.

des formulations décentrées de filtre pour les points frontières, néanmoins pour nos applications (couche de mélange à une direction non homogène) aucune information pertinente n'est présente sur la frontière. On utilisera donc simplement les expressions suivantes si besoin :

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_0 &= \phi_0 \\ \bar{\phi}_1 &= \frac{1}{4} (\phi_0 + 2\phi_1 + \phi_2) \\ \bar{\phi}_2 &= \frac{1}{8} (\phi_0 + 2(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) + \phi_4)\end{aligned}$$

Les expressions sont symétriques sur l'autre frontière.

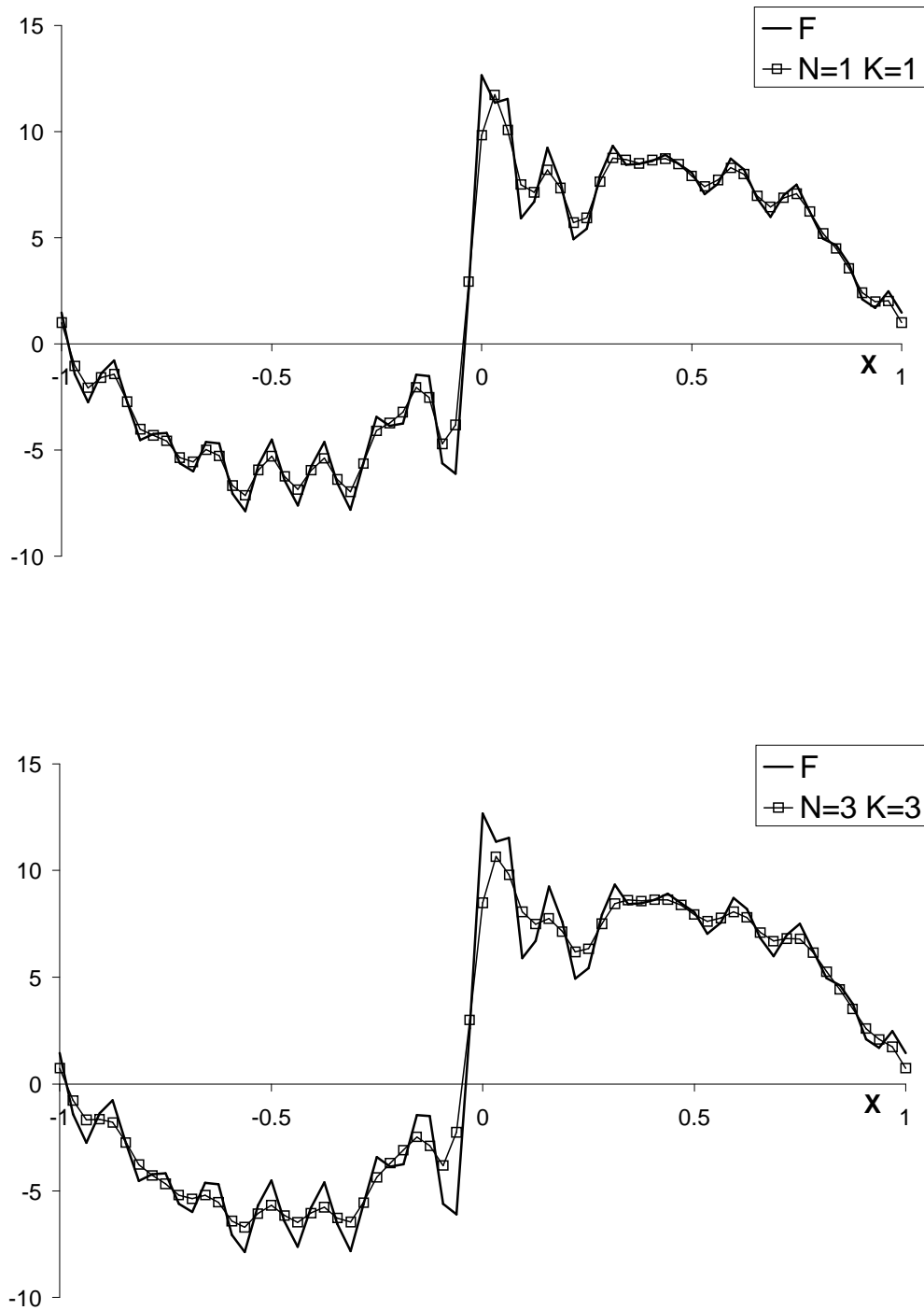


FIG. 2.6 – Effet du filtre discret à moments gaussiens sur une fonction test pour $N = 1/K = 1$ (haut) et $N = 3/K = 3$ (bas). Ici $\gamma = 4$.

Chapitre 3

Équations filtrées

Le filtrage des équations de Navier-Stokes nécessite en théorie l'application d'une intégrale de convolution comme défini en section 2.1. En pratique on se contente d'utiliser le maillage de la grille de calcul comme filtre effectif, ce qui revient à limiter la taille des structures dans l'espace physique (filtre de type boîte), ou le nombre d'harmoniques simulées dans l'espace spectral (filtre de type porte). L'approche du filtrage initiée par Schumann [95] est écartée de ce mémoire.

3.1 Écoulement incompressible mono-espèce

Les équations de Navier-Stokes incompressibles (1.14) (1.15) filtrées sont d'abord données dans l'espace physique puis dans l'espace spectral. Elles font apparaître les termes sous-mailles issus de la non linéarité des équations.

3.1.1 Espace physique

Compte tenu des propriétés de commutation du filtre avec les dérivées partielles, les équations filtrées sont simplement :

$$\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \nu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \tau_{ij} \right\} \quad (3.2)$$

où

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (3.3)$$

est le terme sous-maille à modéliser pour fermer le problème.

3.1.2 Espace spectral

Dans l'espace spectral le filtrage consiste à ne conserver que les modes tels que $|\vec{k}| \leq k_c$, soit à partir de (1.19) :

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2 \right) \bar{u}_i = \bar{t}_i(\vec{k}, t) & \text{si } |\vec{k}| \leq k_c \\ \bar{u}_i = 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.4)$$

Le terme de transfert filtré est décomposé en deux parties : une partie résolue ($t_{i, < k_c}$) et une partie à modéliser (t_{sgs}) [58] :

$$\bar{t}_i = t_{i, < k_c} + t_{sgs}$$

avec

$$t_{i,<k_c}(\vec{k}, t) = -j_c k_j P_{il}(\vec{k}) \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}; |\vec{k}|\leq k_c}^{|\vec{p}| \text{ et } |\vec{q}|\leq k_c} \widehat{u}_l(\vec{p}, t) \widehat{u}_j(\vec{q}, t) d\vec{p}$$

$$t_{sgs}(\vec{k}, t) = -j_c k_j P_{il}(\vec{k}) \int_{\vec{p}+\vec{q}=\vec{k}; |\vec{k}|\leq k_c}^{|\vec{p}| \text{ ou } |\vec{q}|>k_c} \widehat{u}_l(\vec{p}, t) \widehat{u}_j(\vec{q}, t) d\vec{p}$$

3.2 Écoulement compressible mono-espèce

La simulation des grandes échelles d'écoulements compressibles est un sujet récent [20], moins avancé qu'en incompressible. La principale difficulté provient de la définition de l'énergie filtrée qui fait intervenir la trace du terme sous-maille dynamique.

En effet, puisque

$$p = \rho(\gamma - 1) e$$

L'énergie totale est donc

$$\rho e_t = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i$$

et l'énergie totale filtrée s'écrit :

$$\overline{\rho e_t} = \overline{\rho} \tilde{e}_t = \frac{\overline{p}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i + \frac{\tau_{ii}}{2} \quad (3.5)$$

avec

$$\tau_{ij} = \overline{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$$

Plusieurs approches, rappelées par Garnier [33], ont été envisagées dans la littérature pour formuler le système à résoudre. Nous ne mentionnons ici que celle de Vreman [112]. Il s'agit d'une extension naturelle du cas incompressible où les équations sont exprimées en termes de variables calculables le reste formant la partie sous-maille à modéliser. Pour cela on introduit la décomposition :

$$\overline{f}(\rho, u_i, T) = \widehat{f}(\overline{\rho}, \tilde{u}_i, \overline{T}) + \check{f} \quad (3.6)$$

Toute variable filtrée \overline{f} est ainsi la somme d'une partie résolue \widehat{f} et d'une partie non résolue notée \check{f} .

L'énergie résolue est déduite directement de (3.5) :

$$\overline{\rho} \widehat{e}_t = \frac{\overline{p}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$$

On obtient une équation pour $\overline{\rho} \widehat{e}_t$ en combinant (1.2)–(1.4) et (1.12). Le système final d'équations est alors :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \widehat{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + A_{i1} + A_{i2} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho} \widehat{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \widehat{e}_t \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho} \tilde{u}_j) &= -\frac{\partial \widehat{q}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\widehat{\sigma}_{ij} u_i) \\ &+ B_1 + B_2 + B_3 + B_4 + B_5 + B_6 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Les termes sous-maille pour l'équation de quantité de mouvement filtrée s'écrivent en convention d'Einstein :

$$A_{i1} = -\tau_{ij,j} \quad (3.10)$$

$$A_{i2} = \check{\sigma}_{ij,j} \quad (3.11)$$

et pour l'équation de l'énergie :

$$B_1 = -\tilde{u}_i \tau_{ij,j} \quad (3.12)$$

$$B_2 = -\frac{1}{\gamma-1} (\overline{p u_j} - \bar{p} \tilde{u}_j)_{,j} \quad (3.13)$$

$$B_3 = -\overline{p u_{j,j}} + \bar{p} \tilde{u}_{j,j} \quad (3.14)$$

$$B_4 = \overline{\sigma_{ij} u_{i,j}} - \hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_{i,j} \quad (3.15)$$

$$B_5 = (\check{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i)_{,j} \quad (3.16)$$

$$B_6 = -\check{q}_{j,j} \quad (3.17)$$

3.3 Écoulement compressible bi-espèces

L'étude du mélange de gaz par simulation des grandes échelles est nettement plus complexe que les cas précédents et peu de recherches ont été consacrées à la formulation rigoureuse de ce problème. On pourra cependant citer les travaux de Schweitzer et Schley [96] où sont établies les équations filtrées (en approche de Schumann [95]) sans pour autant donner de manière explicite les termes sous-maille. Les termes sous-mailles obtenus par filtrage du système Navier-Stokes en variables primitives sous forme convective (1.8)–(1.11) sont explicités dans cette section. On utilise la convention d'écriture (3.6) précédemment introduite.

Seule l'équation de conservation de la masse est identique au cas compressible mono-espèce :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (3.18)$$

L'équation de quantité de mouvement fait apparaître trois termes sous-maille :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \hat{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + A_{1i} + A_{2i} + A_{3i} \quad (3.19)$$

avec,

$$A_{1i} = -\tau_{ij,j} \quad (3.20)$$

$$A_{2i} = \check{\sigma}_{ij,j} \quad (3.21)$$

$$A_{3i} = -\check{p}_{,i} \quad (3.22)$$

L'équation de l'énergie en fait ressortir dix :

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{C}_v \left[\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right] + \hat{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= \hat{\sigma}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{k} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right) - (\tilde{C}_{p1} - \tilde{C}_{p2}) \hat{J}_j \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \\ &- (r_1 - r_2) \tilde{T} \frac{\partial \hat{J}_j}{\partial x_j} + B_1 + \dots + B_{10} \end{aligned} \quad (3.23)$$

où,

$$B_1 = -\tilde{T}_{,j} \left(\tilde{C}_{p1} - \tilde{C}_{p2} \right) \check{J}_j \quad (3.24)$$

$$B_2 = -\tilde{T} (r_1 - r_2) \check{J}_{j,j} \quad (3.25)$$

$$B_3 = \tilde{u}_{i,j} \check{\sigma}_{ij} \quad (3.26)$$

$$B_4 = \frac{\partial \check{p}}{\partial t} + \tilde{u}_j \check{p}_{,j} \quad (3.27)$$

$$B_5 = -\bar{\rho} \left[\frac{\partial \check{h}}{\partial t} + \tilde{u}_j \check{h}_{,j} \right] \quad (3.28)$$

$$B_6 = - \left[\left(\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2 \right) - \tilde{T} (r_1 - r_2) \right] C_1 \quad (3.29)$$

$$B_7 = - \left[\tilde{k} \tilde{T}_{,j} - \overline{\tilde{k} T}_{,j} + \overline{(h_1 - h_2) J}_j - \left(\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2 \right) \overline{J}_j \right] \quad (3.30)$$

$$B_8 = - \left[\bar{\rho} (\tilde{e} \tilde{u}_j - \tilde{e} \tilde{u}_j) \right]_{,j} \quad (3.31)$$

$$B_9 = - (\overline{\tilde{p} u}_{j,j} - \tilde{p} \tilde{u}_{j,j}) \quad (3.32)$$

$$B_{10} = \overline{\tilde{u}_{i,j} \tilde{\sigma}_{ij}} - \tilde{u}_{i,j} \tilde{\sigma}_{ij} \quad (3.33)$$

Et l'équation des espèces deux :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y} \tilde{u}_j) = - \frac{\partial \hat{J}_j}{\partial x_j} + C_1 + C_2 \quad (3.34)$$

et,

$$C_1 = - \left[\bar{\rho} (\tilde{Y} \tilde{u}_j - \tilde{Y} \tilde{u}_j) \right]_{,j} \quad (3.35)$$

$$C_2 = - \check{J}_{j,j} \quad (3.36)$$

Ces termes sous-maille proviennent des non-linéarités des équations : convectives et diffusives. On notera que l'équation d'état filtrée fait également intervenir un terme sous-maille puisque r n'est plus constant :

$$\bar{p} = \bar{\rho} \tilde{r} \tilde{T} + \bar{\rho} (\overline{\tilde{r} T} - \tilde{r} \tilde{T}) = \hat{p} + \check{p} \quad (3.37)$$

et,

$$\tilde{r} = r_2 + (r_1 - r_2) \tilde{Y}$$

Chapitre 4

Modélisation sous-maille

En l'état actuel les équations filtrées précédemment introduites, (3.1)–(3.2), (3.4), (3.7)–(3.9), (3.18)(3.19) (3.23) (3.34), ne peuvent être résolues car les termes sous-maille font intervenir des grandeurs inaccessibles. Classiquement, on ferme le système en reliant de manière plus ou moins empirique les termes sous maille au champ résolu *via* un modèle de sous-maille.

Piomelli [80] rappelle qu'en théorie ce modèle devrait vérifier les contraintes suivantes :

1. Contraintes mathématiques

- *Invariance tensorielle* : le modèle devrait avoir les mêmes propriétés tensorielles que le terme à modéliser.
- *Invariance galiléenne* : le modèle devrait préserver le comportement des équations quel que soit le repère galiléen considéré.
- *Réalisabilité* : le modèle ne devrait pas conduire à des aberrations statistiques.

2. Contraintes physiques

- *Comportement asymptotique* : si l'écoulement possède un comportement asymptotique le modèle devrait suivre ce comportement.
- *Transferts énergétiques* : le modèle devrait représenter correctement les transferts énergétiques des grosses structures vers les petites (pas d'équation d'évolution de la dissipation visqueuse).
- *Cas limites* : le modèle devrait être inactif dans les parties laminaires de l'écoulement.

3. Contraintes numériques

- *Coût numérique* : le modèle doit posséder un coût numérique acceptable.
- *Réalisabilité discrète* : le modèle ne doit pas déstabiliser le calcul et sa représentation discrète doit avoir les propriétés du modèle continu.

Ces contraintes, aussi légitimes soient-elles, sont trop nombreuses pour être toutes respectées. En pratique le rôle principal du modèle est d'extraire le bon taux *global* d'énergie au voisinage de la coupure, ainsi il n'est pas nécessaire de représenter la contribution sous-maille exacte en chaque point du domaine [80].

Les principales approches de fermeture sont simplement évoquées dans ce chapitre. Elles peuvent être explicites – on donne une expression mathématique du modèle –, ou implicites – la diffusion associée au schéma numérique joue le rôle de modèle.

4.1 Test *a priori*

Avant d'envisager la modélisation effective des termes sous-maille on peut chercher à en obtenir les ordres de grandeur sur quelques écoulements académiques (e.g. couches de mélange). Pour cela on effectue une construction explicite des termes à partir des résultats de SND filtrés, d'où le nom de test *a priori*. Cette approche permet ainsi d'identifier les termes prépondérants qu'il faudrait modéliser et ceux négligeables en première approximation.

Dans une moindre mesure, cette approche autorise la comparaison d'un modèle avec l'action effective des termes sous-mailles comme représenté par Vreman [112] en figure (4.1). Toutefois, un modèle m_{ij} peut avoir un faible taux de corrélation avec le terme sous-maille qu'il représente et conduire à des résultats corrects [65]. Inversement, le modèle peut avoir un bon taux de corrélation et conduire à une simulation instable [113]. On ne cherchera donc pas à obtenir plus d'information que les ordres de grandeur des termes à modéliser par le filtrage *a priori* [66].

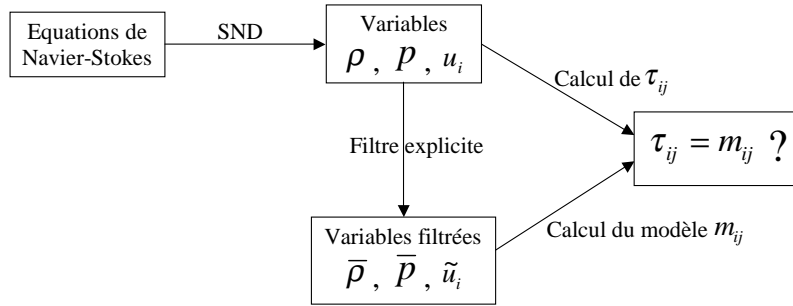


FIG. 4.1 – Illustration de la technique de filtrage *a priori* pour le tenseur de contrainte turbulente τ_{ij} par Vreman [112]

4.2 Fermeture explicite

Sagaut [90] rappelle que lors de la modélisation explicite du terme sous-maille deux approches sont envisageables :

- La modélisation structurelle qui consiste à approcher au mieux le tenseur τ à partir d'une relation du type $\tau = \mathcal{H}(\bar{u})$. Le principal représentant de cette classe est le modèle de similarité d'échelle [4].
- La modélisation fonctionnelle qui consiste à modéliser directement l'action des termes sous-maille sur le champ résolu *via* une relation du type $\nabla \cdot \tau = \mathcal{H}(\bar{u})$. Les modèles de Smagorinsky [100] et de fonction de structure [69] sont les plus utilisés de cette classe.

Ces modèles peuvent être "statiques" (c'est-à-dire insensibles à la nature de l'écoulement et donc toujours actifs) ou "dynamiques" (capables d'adapter localement leur action).

4.2.1 Écoulement incompressible

La fermeture des équations incompressibles filtrées (3.1)–(3.2) est la plus simple : seul le tenseur τ nécessite d'être modélisé. D'une manière générale les modèles incompressibles, aussi bien dans l'espace physique que spectral, ont été utilisés avec succès sur de nombreuses configurations : couche de mélange [19], jet [108], turbulence homogène et isotrope [60]. A titre d'illustration on donne ici un exemple de modélisation fonctionnelle dans les espaces physique

(modèle de Smagorinsky [100]) et spectral (modèle dynamique de Lesieur-Chollet-Metais [18] [69]).

Espace physique

On modélise la partie déviatrice τ^d du tenseur de contraintes sous mailles en partant d'une fermeture par hypothèse de viscosité newtonienne [90] :

$$\tau_{ij}^d = \tau_{ij} - \frac{1}{3}\tau_{ll}\delta_{ij}$$

à partir de la relation :

$$-\nabla\tau^d = \nabla(\nu^t\bar{d}) \quad (4.1)$$

avec

$$d_{ij} = u_{i,j} + u_{j,i}$$

L'équation de quantité de mouvement filtrée (3.2) prend alors la forme :

$$\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{u}_i\bar{u}_j) + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\bar{P}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\{(\nu + \nu^t)\bar{d}_{ij}\}$$

où $\bar{P} = \bar{p} - \rho\tau_{ll}/3$ est la pression modifiée obtenue par résolution d'une équation de Poisson via l'équation de continuité (3.1).

La fermeture est maintenant déplacée au niveau de l'expression scalaire de ν^t . Pour le modèle de Smagorinsky :

$$\nu^t(\vec{x}, t) = (C_s\bar{\Delta})^2 \frac{\sqrt{2}}{2} |\bar{d}(\vec{x}, t)|$$

avec $|\bar{d}|^2 = \bar{d}_{ij}\bar{d}_{ij}$.

La constante de Smagorinsky, C_s , est ajustée en pratique autour de la valeur théorique 0.18, et la longueur de coupure, $\bar{\Delta}$, est généralement prise comme $\bar{\Delta} = (\Delta_x\Delta_y\Delta_z)^{1/3}$ pour un maillage uniforme.

Espace spectral

Dans l'espace spectral, en turbulence homogène et isotrope, Kraichnan [49] propose d'utiliser une fermeture par viscosité turbulente également. L'équation (3.4) devient alors :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\nu + \nu^t(k|k_c))k^2 \right] \bar{u}_i = t_{i,<k_c} \quad (4.2)$$

Chollet et Lesieur [18] normalisent la viscosité turbulente spectrale par la valeur du spectre d'énergie à la coupure :

$$\nu^t(k|k_c) = \nu^{t+}(k|k_c) \left[\frac{\bar{E}(k_c, t)}{k_c} \right]^{1/2} \quad (4.3)$$

de sorte que le modèle soit inactif tant que l'énergie initialement portée par les petits nombres d'onde n'a pas été transférée jusqu'à la coupure k_c . Le spectre d'énergie turbulente est calculé à partir du tenseur de corrélation des vitesses :

$$Q_{ij}(\vec{r}, t) = \langle u'_i(\vec{x}, t) u'_j(\vec{x} + \vec{r}, t) \rangle$$

$$E(k, t) = 2\pi k^2 \widehat{Q}_{ii}(\vec{k}, t) \quad (4.4)$$

Les modèles stochastiques de fermeture en deux points EDQNM [58] prédisent que si k_c est dans la zone inertielle d'un spectre en $-5/3$, alors la viscosité turbulente réduite présente une valeur asymptotique ($\nu^{t+\infty} = 0.267$) pour $k/k_c \rightarrow 0$. Cette valeur est amendée par une fonction correctrice proposée par Chollet [18] afin de prendre en compte la prédominance des transferts locaux pour $k \approx k_c$ (fig. 4.2) :

$$\nu^{t+}(k|k_c) = \nu^{t+\infty} \left(1 + 34.5e^{-3.03(k/k_c)} \right) \quad (4.5)$$

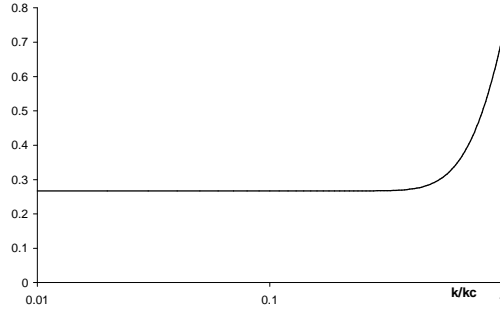


FIG. 4.2 – Viscosité turbulente réduite pour $\nu^{t+\infty} = 0.267$

Métais et Lesieur [69] ont généralisé ce modèle en montrant que si le spectre d'énergie est proportionnel à k^{-m} à la coupure, on obtient une valeur asymptotique :

$$\nu^{t+\infty} = 0.31 C_K^{-3/2} \frac{5-m}{m+1} (3-m)^{1/2} \quad 0 < m \leq 3 \quad (4.6)$$

où la constante de Kolmogorov, C_K , prend la valeur 1.4.

4.2.2 Écoulement compressible mono-espèce

Pour un écoulement compressible, à l'équation de quantité de mouvement (3.8) s'ajoute l'équation de l'énergie (3.9) à fermer. Malgré cette complexité supplémentaire, la SGE d'écoulement compressible a été réalisée avec succès sur de nombreux cas académiques : couche de mélange [99], jet [9], couche limite [24], couche limite supersonique sur rampe de compression [33].

Équation de quantité de mouvement

Comme pour le cas incompressible, le terme sous maille (3.10) est modélisé en séparant parties isotrope et déviatrice :

$$\tau_{ij} = \frac{1}{3} \tau_{ll} \delta_{ij} + \tau_{ij}^d$$

On peut là encore utiliser une fermeture par viscosité newtonienne mais cette fois le filtrage pondéré par la masse est pris en compte. L'équivalent de (4.1) est alors :

$$-\nabla \tau^d = \nabla \left(\bar{\rho} \nu^t \tilde{d} \right)$$

et \tilde{d} est défini comme :

$$\tilde{d}_{ij} = \tilde{u}_{i,j} + \tilde{u}_{j,i}$$

La viscosité turbulente s'exprime directement à partir des expressions incompressibles en remplaçant les grandeurs \bar{f} par \tilde{f} .

Pour la partie isotrope du tenseur de contraintes sous-maille on ne peut plus directement introduire une pression modifiée, des hypothèses supplémentaires doivent être faites.

La manière la plus simple de procéder consiste à négliger τ_{ll} en écrivant :

$$\tau_{ll} = \gamma M_{sgs}^2 \bar{p}$$

où le nombre de Mach sous-maille M_{sgs} est supposé petit lorsque le nombre de Mach est petit [20]. Yoshizawa [116] propose de modéliser ce terme en choisissant une forme compatible avec le modèle pour τ^d :

$$\tau_{ll} = \bar{\rho} C_I \bar{\Delta}^2 |\tilde{d}|$$

En pratique cependant, cette fermeture ne semble rien apporter de plus à la qualité des résultats [27].

Vreman a étudié le terme sous-maille issu de la non linéarité du flux visqueux (eq. 3.11) par des tests *a priori* sur les résultats de SND de couches de mélanges temporelles [112]. Ses conclusions sont que ce type de contribution est négligeable :

$$\bar{\sigma}_{ij} \approx \hat{\sigma}_{ij}$$

Équation de l'énergie

Des tests *a priori* ont également été réalisés sur les termes sous-mailles (3.12)–(3.17) de l'équation de l'énergie filtrée (3.9) sous la forme présentée par Vreman. Les résultats de ces calculs sont rappelés en table (4.1) où l'on a utilisé les conventions suivantes :

- les termes les plus importants sont notés ++
- les termes importants sont notés +
- les termes moins importants sont notés –
- les termes négligeables sont notés 0

A_{i1}	A_{i2}	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5	B_6
++	0	+	+	+	–	0	0

TAB. 4.1 – Importance relative des termes sous-maille de l'équation de l'énergie filtrée (3.9)

Piomelli [80] rappelle que cette étude a permis d'améliorer la qualité des résultats numériques, notamment à résolution marginale. Néanmoins en pratique, de nombreux auteurs [33] se contentent d'utiliser une fermeture basée sur un nombre de Prandtl turbulent, dynamique ou non, en négligeant les contributions des termes B_3 , B_4 et B_5 [71] [27].

4.2.3 Écoulement compressible bi-espèces

Les simulations des grandes échelles d'écoulements multi-espèces, ou même binaires, sont beaucoup plus rares dans la littérature et les hypothèses de fermeture employées sont souvent excessives [15] [101]. Le nombre de termes sous-maille à modéliser est beaucoup plus important qu'en compressible mono-espèce et des corrélations nouvelles : vitesse/fraction massique, température/fraction massique interviennent.

L'approche la plus simple pour fermer le système (3.18) (3.19) (3.23) (3.34) (3.37) consiste à supposer $\check{p} \approx 0$ et négliger les contributions des différents termes sous-maille non académiques (3.21) (3.22) (3.24)–(3.30) (3.33) (3.36) [15]. L'équation de quantité de mouvement (3.19) est alors fermée par hypothèse classique de viscosité newtonienne. La fermeture de l'équation de l'énergie (3.23) est assurée en reliant les transferts énergétiques aux gradients de température (*via* un nombre de Prandtl turbulent), et de fraction massique (*via* un nombre de Schmidt turbulent) [101]. Ce type de fermeture est correct d'un point de vue numérique car il conduit à un système simple et cohérent. Par contre, d'un point de vue physique, le manque d'information sur les ordres de grandeur des différents termes sous-mailles rend le paramétrage des nombres de Prandtl et de Schmidt turbulents délicat, surtout lors d'une approche dynamique.

A notre connaissance aucune étude similaire à celle de Vreman n'a été menée dans le cas de mélanges binaires. Un des objectifs principaux de cette thèse est de fournir une évaluation relative des ordres de grandeur des différents termes sous-maille (3.20)–(3.22) (3.24)–(3.33) (3.35)–(3.36) pour des espèces à faible et fort rapport de masse molaire.

4.3 Fermeture implicite

La fermeture explicite des équations filtrées, compressibles et *a fortiori* multi-espèces, n'est pas évidente et constitue toujours un sujet de recherche actif. Aux problèmes théoriques liés au filtrage des équations (fermeture, commutation, défiltrage des résultats) s'ajoutent des problèmes numériques (taille effective du filtre, erreur de troncature, aliasing) et physiques (positivité des concentrations) lors de la résolution informatique du problème.

Ces nombreuses difficultés ont conduit Boris [11] à considérer une résolution directe des équations de Navier-Stokes projetées sur la grille de calcul à l'aide de schémas numériques à capture de choc. La dissipation non-linéaire intrinsèque à ces méthodes joue alors le rôle de modèle sous-maille implicite. Dans le cas compressible, lorsque l'on utilise des schémas monotones, cette approche est appelée Monotone Integrated Large Eddy Simulation (MILES).

Pour justifier cette méthode, Boris cite Reynolds [87] et rappelle que le but final de la SGE classique ou MILES est le même :

"to compute the three-dimensional time-dependent details of the largest scales of motion (those responsible for the primary transport) using a simple model for the smaller scales. LES is intended to be useful in the study of turbulence physics at high Re , in the development of turbulence models, and for predicting flows of technical interest in demanding complex situations where simpler model approaches (e.g. Reynolds stress transport) are inadequate."

L'approche MILES peut être vue comme un remède, faute de mieux, aux situations difficiles. On se passe ainsi des problèmes de fermeture explicite et on peut alors envisager des configurations géométriques ou physiques complexes. Elaine et al. [26] montrent que si l'écoulement d'intérêt est constitué de grosses structures, comme un jet ou une couche de mélange, en pratique les interactions entre différentes échelles n'ont lieu que sur une décade. Ainsi, si le maillage est suffisamment fin, les grosses structures de l'écoulement ne seront pas pénalisées par la diffusion numérique de la méthode. De plus, Fureby et Grinstein [32] montrent que cette diffusion numérique est de même ordre que celle introduite par un modèle de sous-maille et particulièrement bien adaptée aux écoulements cisailés libres.

Il y a cependant quelques limitations à prendre en compte :

- Tout d'abord il ne faut pas confondre MILES avec une simulation numérique directe sous-résolue. Pour que les résultats obtenus soient corrects, il faut que la coupure ait lieu dans

la zone inertielle.

- Le maillage peut devenir très fin. Boris [11] évoque le nombre de 20 mailles de calcul pour résoudre les structures cohérentes d'un jet.
- Les tests de Garnier [33] sur une turbulence homogène et isotrope montrent que, sur ce cas académique, la SGE classique est plus efficace que le MILES.
- L'approche MILES est difficilement utilisable en présence de paroi où la dégradation du schéma conduit à une forte diffusion numérique.

Pour cela, on réservera cette approche aux cas complexes d'écoulement cisailés libres, en remplaçant la complexité de modélisation par un coût numérique élevé.

Deuxième partie

Outils numériques

Chapitre 5

Erreurs numériques

Ce chapitre est consacré à l'analyse des sources d'erreur liées à la discrétisation des équations de Navier-Stokes par méthode de différences finies. On s'intéresse dans un premier temps à la formulation du terme non linéaire puis aux méthodes de réduction de l'erreur numérique. Les différentes formulations retenues sont ensuite testées de manière statique et dynamique sur la SGE d'une turbulence homogène isotrope (THI) en auto-amortissement. On montre ainsi que l'utilisation d'une formulation convective en association avec une méthode de différences finies à haut pouvoir de résolution conduit à d'excellents résultats, quasi équivalents à ceux d'une méthode pseudo-spectrale désaliasée.

5.1 Généralités

Moin et Mahesh [72] rappellent que la représentation correcte de la large gamme d'échelles présente dans les calculs SND et SGE nécessite de porter une attention particulière à la discrétisation des équations et à la méthode numérique employée. Dans ce chapitre on ne s'intéresse qu'aux erreurs liées aux termes spatiaux. Classiquement on décompose l'erreur numérique en :

- *erreur de troncature* : approximation discrète de l'opérateur de dérivation,
- *erreur d'aliasing* : recouvrement des fréquences résolues par les hautes fréquences non capturables sur la grille.

De nombreuses études théoriques ont été dédiées à l'effet de l'erreur d'aliasing et aux moyens de réduire son influence dans les calculs spectraux [16][74].

Dans l'espace physique, les recherches se sont longtemps focalisées sur l'ordre, la formulation, et la stabilité des schémas aux différences finies. Lele [56] a donné un nouvel élan à ces études en introduisant le concept de "resolving efficiency" (ou "habilité à la dérivation"). Ce travail a conduit à la génération d'une nouvelle classe d'opérateurs de dérivation à haut pouvoir de résolution : les schémas compacts. De même, des méthodes à haut pouvoir de résolution qui conservent la masse, la quantité de mouvement, et l'énergie de manière discrète ont récemment été développées [75][109].

Néanmoins, le problème de l'erreur d'aliasing pour les équations aux dérivées partielles non linéaires avancées dans l'espace physique, *via* les méthodes aux différences finies, n'a pas été clairement formulé. On pourra cependant citer les travaux de Kravchenko et Moin [50] qui ont utilisé le concept de nombre d'onde modifié pour imiter l'effet de la dérivation par différences finies dans l'espace spectral, avant d'extrapoler leurs résultats à l'espace physique. En fait on montrera que cette extrapolation n'est pas directe et peut conduire à des conclusions erronées pour les erreurs d'aliasing et de troncature (surtout en SGE où le spectre d'énergie est rempli

jusqu'à la coupure).

5.1.1 Notations

Dans cette partie on utilise la transformée de Fourier discrète (TFD) plutôt que la forme continue. Pour cela on considère un domaine mono-dimensionnel de longueur 2π ($x \in [0; 2\pi]$), discrétisé de manière uniforme sur $N + 1$ points ($x_i = i\Delta x$; $i = 0, \dots, N$, avec $\Delta x = \frac{2\pi}{N}$). Toute fonction périodique, $u(x)$, est alors représentée par un ensemble de valeurs discrètes :

$$u^N = \{u_i^N ; i = 0, \dots, N - 1\}$$

La transformée de Fourier discrète est donnée par le polynôme d'interpolation trigonométrique de degré $N/2$:

$$I_N u(x_i) = u_i^N = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{u}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.1)$$

$$\hat{u}_k^N = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} u_i^N e^{-j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.2)$$

Les opérateurs de dérivation continue sont notés d/dx pour la dérivée première, et d^2/dx^2 pour la dérivée seconde. Les opérateurs de dérivation discrets associés au noeud i sont notés D_i^1 et D_i^2 respectivement.

5.1.2 Troncature et nombre d'onde modifié

Le nombre d'onde modifié est introduit à partir du développement en série de Fourier de la dérivation discrète :

$$\frac{du}{dx}(x_i) \approx D_i^1(I_N u) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} j_c k'(\omega_k) \hat{u}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.3)$$

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x_i) \approx D_i^2(I_N u) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} -k''(\omega_k) \hat{u}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.4)$$

où $\omega_k = k\Delta x$. Ces expressions sont à comparer avec la formulation exacte des dérivées :

$$\frac{du}{dx}(x_i) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} j_c k \hat{u}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik}$$

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x_i) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} -k^2 \hat{u}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik}$$

Le passage à la pulsation modifiée :

$$\omega'(\omega_k) = \Delta x k'(\omega_k) \quad ; \quad \omega''(\omega_k) = (\Delta x)^2 k''(\omega_k)$$

donne le pouvoir de résolution du schéma indépendamment de la grille. Ainsi, pour une formulation centrée à l'ordre 2 : $\omega'(\omega_k) = \sin(\omega_k)$. Pour un schéma compact centré de dérivation première comme défini par Lele [56] :

$$\beta \left(u'_{i-2} + u'_{i+2} \right) + \alpha \left(u'_{i-1} + u'_{i+1} \right) + u'_i = a \frac{u_{i+1}^N - u_{i-1}^N}{2\Delta x} + b \frac{u_{i+2}^N - u_{i-2}^N}{4\Delta x} + c \frac{u_{i+3}^N - u_{i-3}^N}{6\Delta x} \quad (5.5)$$

Les coefficients du nombre d'onde réduit associé :

$$\omega'(\omega_k) = \frac{a \sin(\omega_k) + (b/2) \sin(2\omega_k) + (c/3) \sin(3\omega_k)}{1 + 2\alpha \cos(\omega_k) + 2\beta \cos(2\omega_k)} \quad (5.6)$$

peuvent être optimisés pour satisfaire des critères d'ordre et de résolution (e.g. 80% de resolving efficiency à 0.1% pour un schéma à l'ordre 6).

5.1.3 Aliasing

Le terme d'aliasing apparaît habituellement lors de l'évaluation par TFD des coefficients de Fourier du produit discret de deux fonctions u et v . Si $w = uv$, les transformées de Fourier discrètes directes et inverses de w sont données par (5.1) et (5.2) :

$$I_N w(x_i) = w_i^N = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \widehat{w}_k^N e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad ; \quad \widehat{w}_k^N = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} u_i^N v_i^N e^{-j_c \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.7)$$

Les coefficients de $I_N w$ sont à comparer avec le calcul exact du produit de convolution [16] :

$$(\widehat{u}^N * \widehat{v}^N)_k = \sum_{n+m=k} \widehat{u}_n^N \widehat{v}_m^N \quad ; \quad n, m = -N/2, \dots, N/2 - 1$$

soit, à partir de (5.7) :

$$\widehat{w}_k^N = \sum_{n+m=k} \widehat{u}_n^N \widehat{v}_m^N + \sum_{n+m=k \pm N} \widehat{u}_n^N \widehat{v}_m^N \quad k = -N/2, \dots, N/2 - 1 \quad (5.8)$$

Le second terme de sommation de l'équation (5.8) est le terme d'aliasing. Il représente l'effet de la grille sur le calcul : elle limite à $N/2$ la fréquence maximale accessible. Le produit uv possédant *a priori* N modes, les fréquences élevées sont redistribuées vers les fréquences inférieures.

Si on "déalias" (5.8) (i.e. on élimine l'erreur d'aliasing par la méthode des 3/2 par exemple [16]) la transformée inverse de \widehat{w}_k^N dans l'espace physique ne redonne pas $w_i^N = u_i^N v_i^N$ aux points de grille. Numériquement, en partant de l'espace physique, on peut simuler la procédure de déaliasing en doublant le nombre de points de discrétisation par interpolation (exacte) de u et v . La représentation spectrale des fonctions est alors :

$$\widehat{u}_k^{2N} = \begin{cases} \widehat{u}_k^N & \text{si } -N/2 \leq k \leq N/2 - 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\widehat{v}_k^{2N} = \begin{cases} \widehat{v}_k^N & \text{si } -N/2 \leq k \leq N/2 - 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Soit,

$$\widehat{w}_k^{2N} = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^{2N-1} u_i^{2N} v_i^{2N} e^{-j_c \frac{2\pi}{2N} ik} \quad ; \quad k = -N, \dots, N - 1 \quad (5.9)$$

avec,

$$I_{2N} w(\bar{x}_i) = w_i^{2N} = \sum_{k=-N}^{N-1} \hat{w}_k^{2N} e^{jc \frac{2\pi}{2N} ik} \quad ; \quad i = 0, \dots, 2N - 1 \quad (5.10)$$

où \bar{x}_i est le terme générique du maillage physique à densité double :

$$\begin{cases} \bar{x}_{2i} = x_i & i = 0, \dots, N \\ \bar{x}_{2i+1} = (x_i + x_{i+1})/2 & i = 0, \dots, N - 1 \end{cases}$$

La différence entre $I_N w$ et $I_{2N} w$ est notée $e(x)$.

$$e(x) = I_N w(x) - I_{2N} w(x)$$

Cet écart, évalué aux noeuds communs ($x_i = \bar{x}_{2i}$), fait intervenir deux contributions. L'une est l'aliasing sur le maillage à N points, l'autre est la somme des fréquences supérieures à la coupure ($|k| > N/2$). Aux noeuds x_i , il s'écrit :

$$e_i = e(x_i) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left(\sum_{n+m=k \pm N} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N \right) e^{jc \frac{2\pi}{N} ik} - \left\{ \sum_{k=-N}^{-N/2-1} \left(\sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N \right) e^{jc \frac{2\pi}{2N} 2ik} + \sum_{k=N/2}^{N-1} \left(\sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N \right) e^{jc \frac{2\pi}{2N} 2ik} \right\}$$

et est nul par définition. I_{2N} possède donc un contenu spectral exact jusqu'à $|k| = N/2$ et des valeurs physiques également exactes en x_i .

5.2 Termes non linéaires et dérivation

Les termes non linéaires qui nous intéressent sont ceux issus des équations de Navier-Stokes. Ces termes peuvent être modélisés en 1D par la forme divergente : $\frac{d}{dx}(uu)$, ou convective : $u \frac{du}{dx}$. Bien que ces deux formes soient mathématiquement équivalentes (à un facteur 2 près), on montre que leur comportement discret est différent.

5.2.1 Forme divergente

En posant $w = uu$, d'après (5.3), l'expression de la dérivée du polynôme d'interpolation trigonométrique associé à w conduit à la série de Fourier :

$$\frac{dw}{dx}(x_i) \approx D_i^1(I_N w) = \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} j_c k'(\omega_k) \hat{w}_k^N e^{jc \frac{2\pi}{N} ik} \quad (5.11)$$

Le coefficient $\hat{w}_k^N = j_c k'(\omega_k) \hat{w}_k^N$ fait intervenir à la fois l'erreur de troncature et d'aliasing. Dans l'espace physique on compare sur un exemple simple les résultats de $D_i^1(I_N w)$ aliasé, $D_i^1(I_N w)$ déaliasé et de $I_N \frac{dw}{dx}$. La fonction test est :

$$u(x) = \sin(15x)$$

et donc,

$$w(x) = \frac{1}{2} (1 - \cos(30x))$$

Erreur de troncature seule

Afin de ne considérer que l'effet de l'erreur de troncature, on utilise un maillage capable de supporter au minimum 30 modes. On compare pour $N = 64$ et $N = 128$ les schémas compacts à l'ordre 6 [56] et les différences finies centrées d'ordre 2. L'influence du nombre d'onde modifié sur la fonction dérivée est très nette (fig. 5.1), surtout à résolution marginale où la fréquence test est proche de la fréquence de coupure.

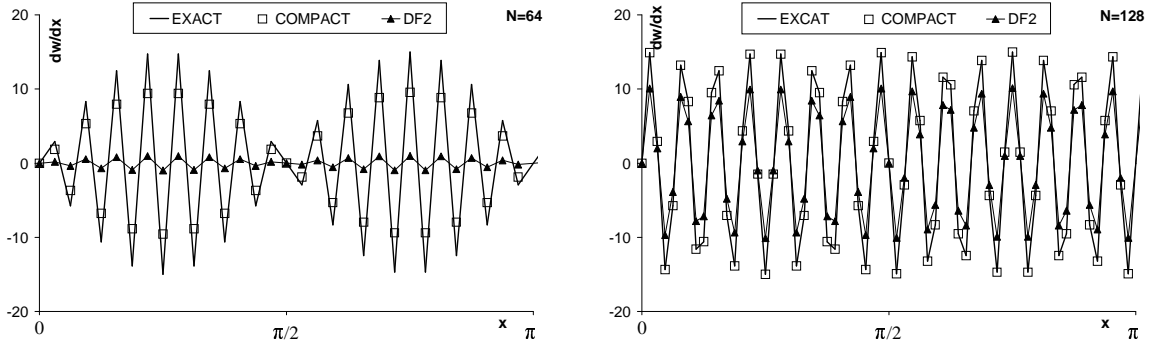


FIG. 5.1 – Formulation divergente. Dérivées exacte et discrète par schéma compact et par différences finies centrées d'ordre 2. Effet de raffinement de maillage.

Erreur d'aliasing seule

Sur une grille limitée à 16 modes ($N = 32$), le mode 30 aliase le mode -2 et $I_N(w)$ ressemble à une onde de fréquence 2 (fig. 5.2). Les valeurs aux points de grille sont exactes, mais les fréquences sont fausses.

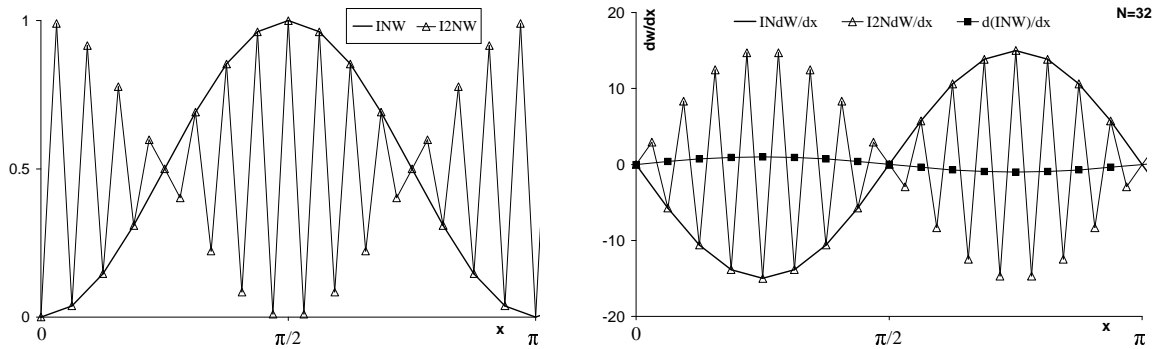


FIG. 5.2 – Formulation divergente. Polynôme d'interpolation trigonométrique simple et double (gauche). Effet de l'erreur d'aliasing sur la dérivation (droite).

On écarte l'effet de troncature en considérant une dérivation spectrale. Les valeurs nodales de la dérivation de l'interpolation sur grille double $\left(\frac{dI_{2N}w(x)}{dx}\right)$ sont identiques à la dérivation exacte $I_N \frac{dw}{dx}$. Par contre, la dérivation de l'interpolation trigonométrique sur grille simple conduit à des valeurs erronées. Si on applique une méthode de déaliasing (e.g. règle des 3/2) avant d'effectuer le calcul de la dérivée, le problème est dégénéré puisque cela revient à dériver la fonction nulle.

Cet exemple montre clairement que la comparaison entre calcul spectral et calcul dans l'espace physique n'est possible que si l'on considère la partie aliasée des spectres.

Erreurs de troncature et d'aliasing

Compte tenu des figures (5.1) et (5.2), la combinaison des deux types d'erreurs précédentes atténuée d'autant plus les modes parasites que le pouvoir de résolution du schéma de dérivation est mauvais, l'aliasing basse fréquence n'est donc pas atteint par l'erreur de troncature (fig. 5.3).

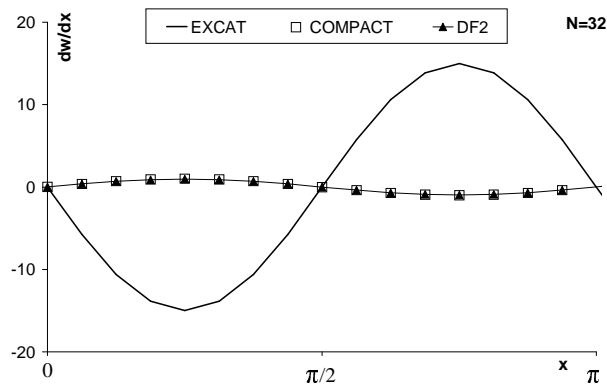


FIG. 5.3 – Dérivation de la forme divergente aliasée.

5.2.2 Forme convective

La forme convective du terme non linéaire, $u \frac{du}{dx}$, nécessite d'effectuer la dérivation de la fonction u avant le produit. La dérivation est donc menée sur un champ totalement capturé par la grille et il n'y a plus de problème d'aliasing au sens où seule la valeur nodale (et non la fréquence) du produit $u \frac{du}{dx}$ nous intéresse dans ces tests statiques.

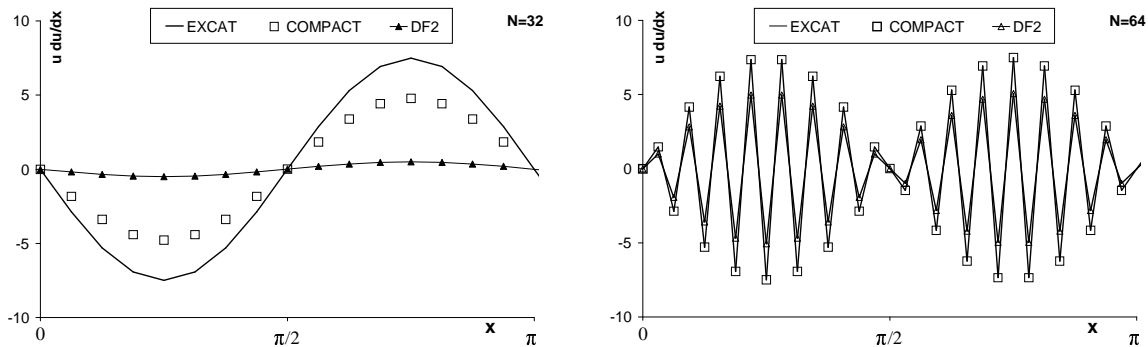


FIG. 5.4 – Formulation convective, dérivées exacte, discrètes par schéma compact et par différences finies centrées d'ordre 2. Effet de raffinement de maillage.

5.2.3 Tests dynamiques

En pratique, au cours de la résolution numérique d'un problème instationnaire, l'erreur numérique est produite et accumulée à chaque pas de temps et le contrôle de cette erreur (dynamique) assure la stabilité de la méthode. On mène ici des tests sur l'équation de Burgers visqueuse. Pour cela, on cherche une solution numérique périodique sur l'intervalle $[0; 2\pi]$ au problème aux conditions initiales :

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + NL(u(x, t)) - \nu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (5.12)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (5.13)$$

NL dans (5.12) désigne le terme non linéaire, pouvant être pris de façon convective ou divergente. Ce problème possède le double avantage d'avoir une solution analytique *via* la transformation de Cole-Hopf pour toute condition initiale u_0 et de présenter un contenu spectral riche [115].

Forme divergente

Sous forme divergente, le terme non linéaire s'écrit :

$$NL(u(x, t)) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2(x, t)}{2} \right)$$

La méthode des lignes appliquée à (5.12) conduit à un système de N équations semi-discrètes :

$$\frac{du_i^N}{dt} + \frac{1}{2} D_i^1 (u^N u^N) - \nu D_i^2 (u^N) = 0 \quad ; \quad i = 0, \dots, N-1 \quad (5.14)$$

où $(u^N u^N)$ est le vecteur de composante $u_i^N u_i^N$. Dans l'espace spectral, le calcul du terme non linéaire par méthode pseudo-spectrale est couplé au nombre d'onde modifié comme décrit par (5.11). Ainsi, il faut résoudre :

$$\frac{d\hat{u}_k^N}{dt} + \frac{1}{2} j_c k'(\omega_k) \left[\sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{u}_m^N + \sum_{n+m=k \pm N} \hat{u}_n^N \hat{u}_m^N \right] + \nu k''(\omega_k) \hat{u}_k^N = 0 \quad (5.15)$$

$$k = -N/2, \dots, N/2 - 1$$

Si une méthode de déaliasing est employée, on avance en temps la solution de :

$$\frac{d\hat{u}_k^N}{dt} + \frac{1}{2} j_c k'(\omega_k) \left[\sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{u}_m^N \right] + \nu k''(\omega_k) \hat{u}_k^N = 0$$

$$k = -N/2, \dots, N/2 - 1$$

soit de manière équivalente dans l'espace physique :

$$\frac{du_i^N}{dt} + \frac{1}{2} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \left[j_c k'(\omega_k) \sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{u}_m^N \right] e^{j_c \frac{2\pi}{N} ik} - \nu D_i^2 (u^N) = 0 \quad (5.16)$$

Les solutions physique et spectrale à $t = 1.6$ pour le cas aliasé (5.15) sont présentées en figure (5.5). L'intégration en temps a été effectuée avec un schéma Runge-Kutta du quatrième ordre, on a fixé $Nx = 128$, $\nu = 0.01$, $u_0(x) = \sin(x)$ et choisi $\Delta t = 10^{-4}$ afin de repousser les erreurs

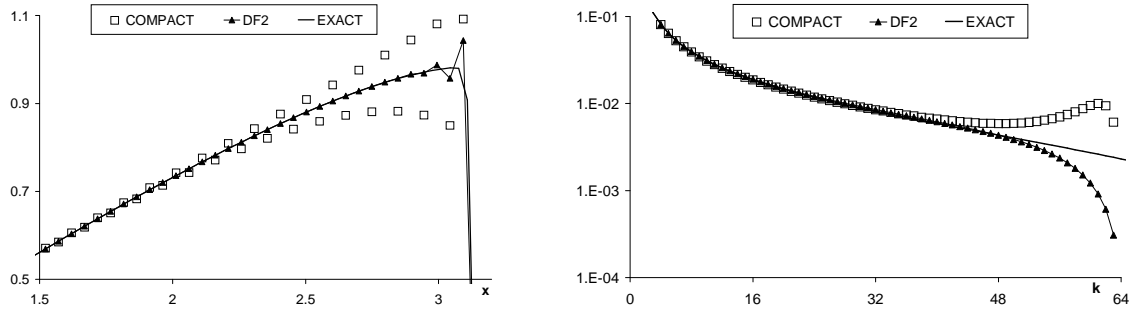


FIG. 5.5 – Formulation divergente. Comparaison des solutions physique (gauche) et spectrale (droite) pour la résolution de l'équation de Burgers visqueuse ($\nu = 0.01$), pour le schéma compact d'ordre 6 et les différences finies centrées d'ordre 2, à $t=1.6$

d'intégration temporelle au-delà des erreurs spatiales.

On voit nettement sur le spectre de la solution (fig. 5.5) que la méthode centrée à l'ordre 2 (notée DF2), couplée avec le schéma RK4, atténue les fréquences élevées. Le faible pouvoir de résolution de cette méthode agit comme un filtre écrasant les modes élevés créés par non-linéarité. *A contrario* le schéma compact n'introduit presque pas d'erreur de troncature. L'aliasing est prédominant et se traduit par un empilement d'énergie aux hautes fréquences et une sous-résolution manifeste du calcul.

Ce premier exemple montre, qu'à résolution marginale, la forme divergente peut être acceptable seulement en utilisation avec une méthode à forte diffusion numérique.

Forme convective

Sous forme convective, le terme non linéaire s'écrit :

$$NL(u(x, t)) = u(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$$

Soit à résoudre par la méthode des lignes :

$$\frac{du_i^N}{dt} + u_i^N D_i^1(u^N) - \nu D_i^2(u^N) = 0 \quad ; \quad i = 0, \dots, N-1$$

Ou dans l'espace spectral sous forme aliasée :

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{u}_k^N}{dt} + j_c k'(\omega_k) + \sum_{n+m=k} [\hat{u}_n^N (j_c k'(\omega_m) \hat{u}_m^N)] \\ + \sum_{n+m=k \pm N} [\hat{u}_n^N (j_c k'(\omega_m) \hat{u}_m^N)] + \nu k''(\omega_k) \hat{u}_k^N = 0 \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$k = -N/2, \dots, N/2 - 1$$

L'obtention de la formulation désaliasée est directe.

Les solutions physique et spectrale à $t = 1.6$ pour le cas aliasé (5.17) sont tracées en figure (5.6), pour les mêmes paramètres que précédemment.

Cette fois-ci le schéma compact présente un excellent comportement, proche de la solution de

référence, alors que la méthode de différences finies centrées d'ordre 2 est incorrecte. Le faible pouvoir de résolution de ce schéma introduit une erreur de type dispersif qui pollue la solution sur une large gamme de fréquences. La réduction des erreurs d'aliasing et de troncature de la forme compact, couplée à la formulation convective, présente donc un compromis intéressant pour la résolution des équations de Navier-Stokes, surtout en SGE où le contenu spectral des champs est important au voisinage de la coupure. Ces conclusions seront affinées dans les sections suivantes.

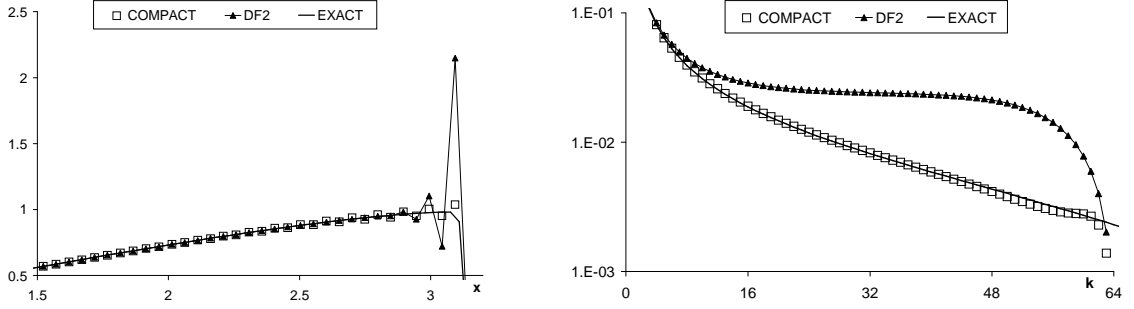


FIG. 5.6 – Formulation convective. Comparaison des solutions physique (gauche) et spectrale (droite) pour la résolution de l'équation de Burgers visqueuse ($\nu = 0.01$), pour le schéma compact d'ordre 6 et les différences finies centrées d'ordre 2, à $t=1.6$

5.3 Validation physique

La section précédente a permis d'illustrer le comportement de différentes formes du terme non linéaire sur des exemples mathématiques. On s'intéresse maintenant à l'effet de l'erreur d'aliasing sur la physique simulée. Pour cela on considère la simulation temporelle d'une couche de mélange plane compressible.

5.3.1 Équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes écrites sous forme conservative faible sont déduites à partir de (1.2)–(1.4). On a donc ici :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} = \vec{V} \quad (5.18)$$

avec $\vec{U} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho e_t]^T$, ou de manière équivalente (mathématiquement), sous forme convective toujours en variables conservatives :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + [\tilde{A}^F] \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} + [\tilde{A}^G] \frac{\partial \vec{U}}{\partial y} = \vec{V} \quad ; \quad [\tilde{A}^F]_{ij} = \frac{\partial \tilde{F}_i}{\partial U_j} \quad [\tilde{A}^G]_{ij} = \frac{\partial \tilde{G}_i}{\partial U_j} \quad (5.19)$$

5.3.2 Résolution numérique

On résout les systèmes (5.18) et (5.19) sur un domaine plan, périodique selon la direction longitudinale (x). On applique des conditions non réfléchives du type NSCBC [81] sur la direction transversale (y). Les dérivations spatiales sont assurées par des schémas compacts centrés à

l'ordre 6, dégradés aux points frontière selon y [56]. L'avancement en temps est réalisé grâce à une méthode de Runge-Kutta du troisième ordre à stockage réduit [16], le pas de temps est limité par une condition de CFL.

Le fluide considéré est l'air, l'écoulement est supposé isotherme initialement. On choisit comme condition initiale un profil en tangente hyperbolique pour la vitesse longitudinale, et un bruit blanc de faible amplitude pour la vitesse transversale.

Le nombre de Reynolds, basé sur l'épaisseur de vorticit  initiale (δ) et la vitesse infinie de la couche de cisaillement vaut 200 pour un nombre de Mach convectif de 0.6. Le domaine de calcul : $Lx = 45\delta$, $Ly = 50\delta$, est discr t s  selon $Nx = 256$, $Ny = 256$ points.

5.3.3 R sultats

La diff rence au niveau des calculs provient uniquement de la mani re dont est  valu  le terme non lin aire. Le champ de vorticit  pour les deux cas au m me instant, $t = 60t_{ref}$, est repr sent  en figure (5.7).

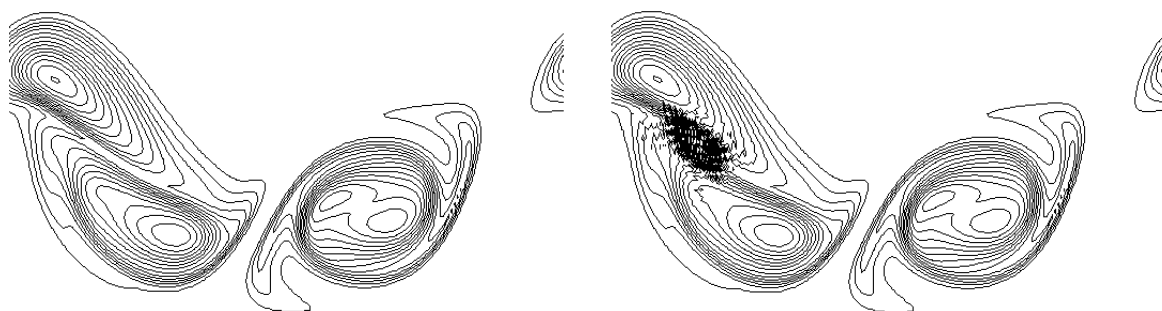


FIG. 5.7 – Effet de la formulation du terme non lin aire sur la r solution num rique des  quations de Navier-Stokes pour la couche de m lange temporelle plane. Forme convective (gauche) et divergente (droite). Champ de vorticit    $t=60$.

Au d but de la simulation les deux m thodes sont  quivalentes, les structures coh rentes  mergent aux m mes instants et aux m mes positions. Lorsque les premiers appariements tourbillonnaires interviennent, l' coulement est tr s fortement cisail  localement ce qui se traduit par un contenu spectral important des champs. A partir de ce moment les erreurs d'aliasing dans l'espace physique, propres   chacune des m thodes, polluent la solution. La forme divergente montre des signes de sous r solution et d'instabilit  (oscillations dans la zone de cisaillement), alors que la forme convective accepte sans probl me la coalescence.

Ce test physique confirme les conclusions de la section pr c dente : la forme convective associ e   un sch ma   haut pouvoir de r solution minimise les erreurs dans l'espace physique.

5.4 R duction des erreurs

Malgr  l'importance des erreurs num riques introduites par la forme divergente en r solution marginale, celle-ci est largement utilis e en pratique (dans l'espace physique) [75] [109], notamment pour les  coulements compressibles avec choc [35].

La diff rence entre les formes convective et divergente r side dans l'erreur d'aliasing produite.

Si dans l'espace spectral les méthodes de déaliasing sont bien établies [16], les choses sont en revanche moins claires dans l'espace physique. Dans cette section on compare deux approches destinées à réduire l'erreur d'aliasing physique de la forme divergente :

- une méthode de filtrage explicite sur maillage raffiné proposée par Ghosal [34],
- une méthode d'interpolation compacte [30].

5.4.1 Filtrage

Ghosal [34] a proposé récemment une technique de filtrage pour réduire l'erreur numérique associée au terme non linéaire (aliasing et troncature). Si on s'intéresse uniquement à un contenu spectral des champs inférieur au mode $k_s = \pi N/L = N/2$, on peut utiliser un maillage plus fin composé de M points de grille (qui possède donc une coupure numérique supérieure $k_c = M/2$) et appliquer un filtre passe-bas (du type porte) afin d'éliminer les modes compris entre k_s et k_c (générés par les interactions non linéaires). D'après la règle des 3/2 dans l'espace spectral, il conclut que si $k_s < 2k_c/3$ l'erreur d'aliasing est éliminée. Une technique similaire a été utilisée par Lund [63] pour la SGE de turbulence isotrope.

Principe théorique

Le filtrage appliqué au terme non linéaire sous forme divergente s'écrit pour l'équation de Burgers semi-discrète :

$$\frac{du_i^M}{dt} + \frac{1}{2}D_i^1 (F(u^M u^M)) - \nu D_i^2 (u^M) = 0 \quad ; \quad i = 0, \dots, M-1 \quad (5.20)$$

où $F(\cdot)$ est l'opérateur de filtrage. Ainsi, si on suppose que le filtre est idéalement le filtre porte, les coefficients de Fourier filtrés de u sont :

$$\bar{u}_k^M = \hat{F}(k) \hat{u}_k^M = \begin{cases} \hat{u}_k^M & \text{si } |k| \leq k_s \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

et le polynôme d'interpolation trigonométrique devient :

$$I_M F(u^M u^M)(x_i) = \sum_{k=-M/2}^{M/2-1} \hat{F}(k) \hat{u}_k^M e^{j_c \frac{2\pi}{M} ik} = \sum_{k=-k_s}^{k_s} \hat{u}_k^M e^{j_c \frac{2\pi}{M} ik} \quad ; \quad i = 0, \dots, M-1$$

Soit dans l'espace spectral :

$$\frac{d\hat{u}_k^M}{dt} + \frac{1}{2}k'(\omega_k) \hat{F}(k) \left(\sum_{n+m=k} \hat{u}_n^M \hat{u}_m^M + \sum_{n+m=k \pm M} \hat{u}_n^M \hat{u}_m^M \right) + \nu k''(\omega_k) \hat{u}_k^M = 0$$

$$k = -M/2, \dots, M/2 - 1 \quad ; \quad \hat{u}_k^M = 0 \quad \text{si } N/2 < |k| \leq M/2$$

L'erreur d'aliasing est donc nulle jusqu'à $|k| = k_s$ si $k - n \pm M = \pm k_s$, soit $k_s = M/3 = 2/3k_c = N/2$.

Application pratique

En pratique, les filtres employés dans l'espace physique ne sont que des approximations de la fonction porte. Les filtres compacts pentadiagonaux de Lele [56] semblent être le meilleur compromis entre facilité d'optimisation et faible niveau d'erreur. Ils sont construits sur la molécule

suivante :

$$\begin{aligned} \beta (\widehat{u}_{i-2}^N + \widehat{u}_{i+2}^N) + \alpha (\widehat{u}_{i-1}^N + \widehat{u}_{i+1}^N) + \widehat{u}_i^N = & a u_i^N + \frac{b}{2} (u_{i-1}^N + u_{i+1}^N) \\ & + \frac{c}{2} (u_{i-2}^N + u_{i+2}^N) + \frac{d}{2} (u_{i-3}^N + u_{i+3}^N) \end{aligned} \quad (5.21)$$

et possèdent la fonction de transfert :

$$\widehat{F}(\omega_k) = \frac{a + b \cos(\omega_k) + c \cos(2\omega_k) + d \cos(3\omega_k)}{1 + 2\alpha \cos(\omega_k) + 2\beta \cos(2\omega_k)}$$

Ces filtres vérifient automatiquement la condition $\frac{d\widehat{F}}{d\omega}(\pi) = 0$. On peut disposer de deux paramètres d'optimisation de la fonction de transfert en imposant un filtre d'ordre 6, ou d'ordre 4 avec la condition supplémentaire : $\frac{d^2\widehat{F}}{d\omega^2}(\pi) = 0$. Les fonctions de transfert de trois filtres aussi raides que possibles dans le voisinage $\omega = 2/3\pi$ sont présentées en figure (5.8). Le nombre d'onde modifié de l'opérateur couplé dérivation/filtrage ($D \circ F$) est tracé en figure (5.9). La perte de résolution (au voisinage de $\omega = \pi/2$) est due au caractère imparfait du filtre comparativement au filtre porte.

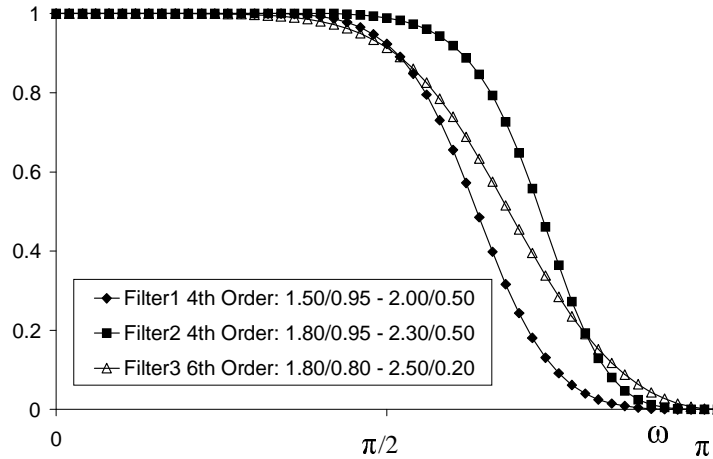


FIG. 5.8 – Fonction de transfert de trois filtres compacts pentadiagonaux

5.4.2 Interpolation

Une autre technique originale de réduction des erreurs d'aliasing dans l'espace physique est l'interpolation. On a en effet vu en section 5.2 que l'erreur d'aliasing apparaît du fait de la troncature du produit de convolution discret et disparaît si on dispose d'une grille double. Le problème revient alors à évaluer $I_N w(\bar{x}_i) = u_i^{2N} u_i^{2N}$, c'est-à-dire à interpoler la fonction u sur une grille de densité double avec le plus grand soin possible. Une fois encore, les schémas d'interpolation de Lele [56] sont d'excellents candidats du fait de leur haut pouvoir de résolution. Ces schémas s'écrivent de manière générique :

$$\begin{aligned} \beta (u_{i-2}^N + u_{i+2}^N) + \alpha (u_{i-1}^N + u_{i+1}^N) + u_i^N = & \frac{a}{2} (u_{i-1/2}^N + u_{i+1/2}^N) \\ & + \frac{b}{2} (u_{i-3/2}^N + u_{i+3/2}^N) + \frac{c}{2} (u_{i-5/2}^N + u_{i+5/2}^N) \end{aligned} \quad (5.22)$$

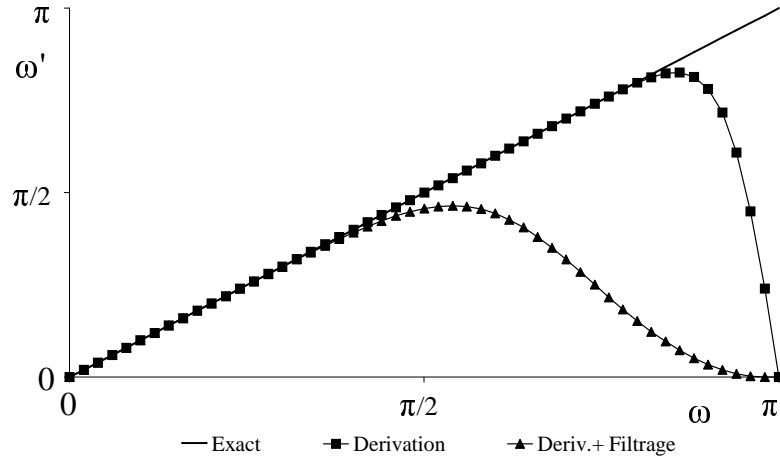


FIG. 5.9 – Nombre d'onde modifié de l'opérateur de dérivation compacte centré d'ordre 6 avec le filtre 3 de la figure (5.8)

La fonction de transfert associée :

$$T(\omega_k) = \frac{a \cos(\omega_k/2) + b \cos(3\omega_k/2) + c \cos(5\omega_k/2)}{1 + 2\alpha \cos(\omega_k) + 2\beta \cos(2\omega_k)}$$

est tracée en figure (5.10) pour un schéma d'ordre 6, tel que $T = 1$ et $\frac{dT}{d\omega_k} = 0$ pour $\omega_k = 2.10, 2.25, 2.50$.

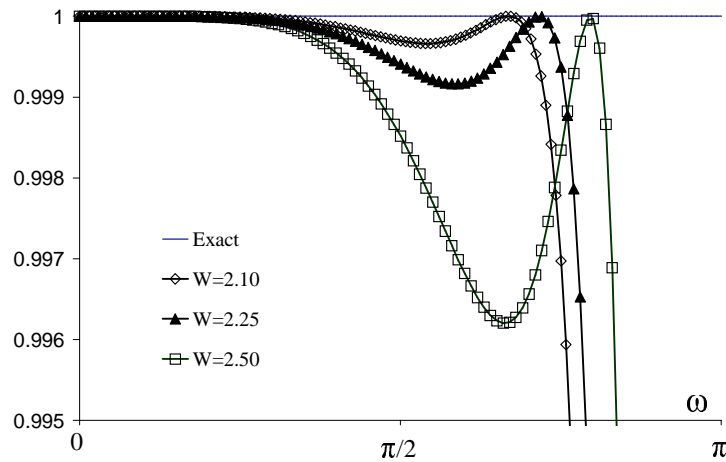


FIG. 5.10 – Fonction de transfert des trois schémas d'interpolation compacts

Cet outil permet de construire un nouvel ensemble de valeurs de taille $2N$ pour u , noté \bar{u}^{2N} , en intercalant les valeurs exactes (u^N) et les valeurs interpolées (\bar{u}^N) comme représenté en figure (5.11).

Soit,

$$\begin{cases} \bar{u}_{2i}^{2N} = u_i^N & ; & i = 0, \dots, N \\ \bar{u}_{2i+1}^{2N} = \bar{u}_i^N & ; & i = 0, \dots, N-1 \end{cases}$$

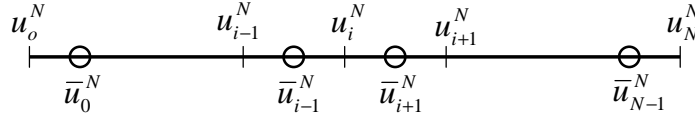


FIG. 5.11 – Principe d'interpolation

avec

$$\bar{u}_i^N = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} T(\omega_n) \hat{u}_n^N e^{jc \frac{2\pi}{N} in}$$

Les coefficients de Fourier de la fonction ainsi construite sont alors :

$$\hat{u}_n^{2N} = \frac{1}{2N} \sum_{m=-N/2}^{N/2-1} \left[\hat{u}_m^N \left(1 + T(\omega_n) e^{jc \frac{\pi}{N}(m-n)} \right) \sum_{i=0}^{N-1} e^{jc \frac{2\pi}{N} i(m-n)} \right] \quad (5.23)$$

La propriété d'orthogonalité de la base complexe permet de simplifier (5.23) :

$$\hat{u}_n^{2N} = \begin{cases} \frac{1}{2} [1 - T(\omega_{n+N})] \hat{u}_{n+N}^N & \text{si } -N \leq n < -\frac{N}{2} \\ \frac{1}{2} [1 + T(\omega_n)] \hat{u}_n^N & \text{si } -\frac{N}{2} \leq n \leq +\frac{N}{2} \\ \frac{1}{2} [1 - T(\omega_{n-N})] \hat{u}_{n-N}^N & \text{si } +\frac{N}{2} < n \leq +N \end{cases} \quad (5.24)$$

Ou encore dans l'espace physique :

$$\bar{u}_i^{2N} = \frac{1}{2} \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} [(e^{jc\pi i} + 1) + (e^{jc\pi i} - 1) T(\omega_n)] \hat{u}_n^N e^{jc \frac{2\pi}{2N} in}$$

$$i = -N, \dots, N-1$$

Les coefficients de Fourier du produit de convolution de deux fonctions u et v s'expriment alors comme :

$$\hat{w}_k^{2N} = \frac{1}{2N} \sum_{i=0}^{2N-1} \bar{u}_i^{2N} \bar{v}_i^{2N} e^{jc \frac{2\pi}{2N} ik}$$

Soit après calcul :

$$\hat{w}_k^{2N} = \frac{1}{2} \sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N (1 + T(\omega_n) T(\omega_m)) + \frac{1}{2} \sum_{n+m=k \pm N} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N (1 - T(\omega_n) T(\omega_m)) \quad (5.25)$$

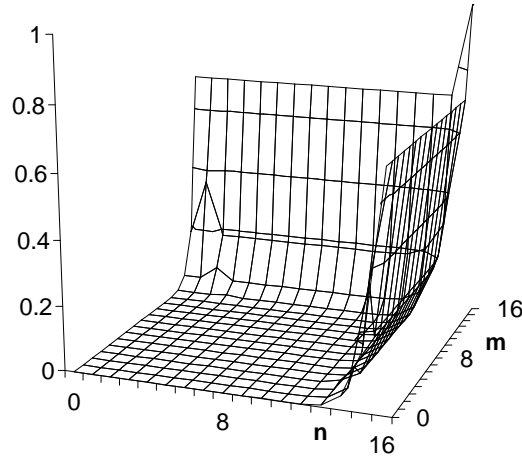
$$n, m = -N/2, \dots, N/2-1 \quad ; \quad k = -N, \dots, N-1$$

On notera que ces expressions, et notamment (5.24) (5.25), sont cohérentes avec le cas de l'interpolation exacte ($T = 1$) présenté en section (5.1.3).

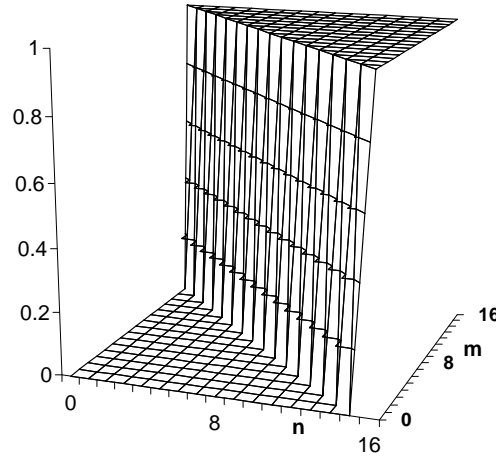
L'erreur introduite sur le coefficient de Fourier (5.25) par la fonction de transfert par rapport au cas de l'interpolation exacte (5.10) :

$$\hat{w}_k^{2N} - \hat{w}_k^{2N} = \frac{1}{2} \sum_{n+m=k} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N (1 - T(\omega_n) T(\omega_m)) - \frac{1}{2} \sum_{n+m=k \pm N} \hat{u}_n^N \hat{v}_m^N (1 - T(\omega_n) T(\omega_m))$$

$$n, m = -N/2, \dots, N/2-1 \quad ; \quad k = -N, \dots, N-1$$


 FIG. 5.12 – Erreur spectrale pour le mode $n + m = k$ de l'interpolateur compact

est tracée en figure (5.12) pour le mode $k = n + m$ des fonctions réelles u et v telles que $\widehat{u}_n^N = \widehat{v}_m^N = 1$; $n, m \geq 0$, $N = 32$. Cette méthode d'interpolation permet de réduire l'erreur d'aliasing sur une large gamme de nombre d'onde (fig. 5.13).


 FIG. 5.13 – Spectre de l'erreur d'aliasing pour le mode $n + m = k$ après interpolation compacte

Une fois \overline{w}^{2N} construit, on peut dériver cette fonction sur la grille double et ne retenir que les résultats aux noeuds solides : $x_i = \overline{x}_{2i}$:

$$D_{2i}^1(\overline{w}^{2N}) = \sum_{k=-N}^{N-1} j_c k'(\omega_k) \widehat{w}_k^{2N} e^{j_c \frac{2\pi}{2N} 2ik}$$

Le pouvoir de résolution du schéma derivation/interpolation est alors double. On notera tout de même que l'équation (5.25) produit deux termes, l'un principal pour la contribution $n + m = k$, l'autre d'aliasing (ou parasite) pour $n + m = k \pm N$. Ainsi on a :

$$\overline{k}'(\omega_{n+m=k}) = \frac{1}{2} k'(\omega_k) (1 + T(\omega_n) T(\omega_m)) \quad (5.26)$$

$$\bar{k}'(\omega_{n+m=k-N}) = \frac{1}{2}k'(\omega_k)(1 - T(\omega_n)T(\omega_m)) \quad (5.27)$$

On a représenté en figure (5.14) ces nombres d'onde modifiés (5.26) (5.27) pour le cas $n = m$. La perte de pouvoir de résolution est liée au caractère imparfait de l'opérateur d'interpolation mais reste négligeable comparée à l'erreur introduite par la méthode de filtrage (fig. 5.9).

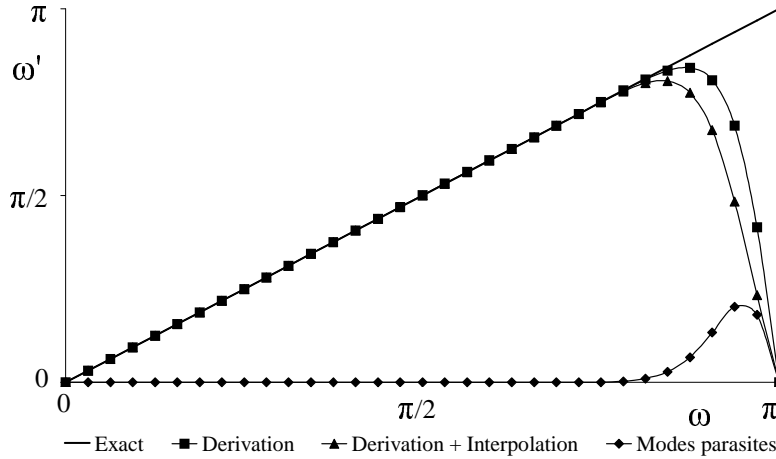


FIG. 5.14 – Fonction de transfert de l'opérateur Dérivation/Interpolation compact

Appliquée à l'équation de Burgers visqueuse, la technique d'interpolation donne simplement :

$$\frac{du_i^M}{dt} + \frac{1}{2} \sum_{k=-N}^{N-1} j_c k'(\omega_k) \widehat{w}_k^{2N} e^{j_c \frac{2\pi}{2N} 2ik} - \nu D_i^2 (u^M) = 0 \quad ; \quad i = 0, \dots, N-1 \quad (5.28)$$

5.4.3 Comparaison

On compare maintenant l'efficacité de la méthode de filtrage de Ghosal à notre méthode d'interpolation sur des tests statiques et dynamiques.

Tests statiques

On s'intéresse à la fonction $w(x) = u^2(x)$ construite à partir de $u(x) = \sin(k_1 x) + \sin(k_2 x)$ avec $N = 32$ (soit $M = 48$). On considère deux couples de valeurs (k_1, k_2) , l'un conduisant à une fonction non aliasée sur la grille : $(k_1, k_2) = (6, 8)$, l'autre à une fonction aliasée : $(k_1, k_2) = (10, 13)$. Le résultat du filtrage est présenté en figure (5.15). Pour le cas non aliasé, le caractère imparfait du filtre conduit à un léger écart avec la fonction de base. Pour le cas aliasé, le filtre atténue fortement les modes 20 et 23 qui auraient pu être représentés par la grille à $M = 48$, et le mode 26 qui alias le mode 22. Il ne reste au final que la contribution du mode 3 et une erreur importante aux noeuds de calcul. La méthode d'interpolation, elle, n'affecte pas les valeurs aux noeuds solides.

La dérivation de la forme quadratique filtrée ou interpolée conduit aux courbes de la figure (5.16). Le calcul interpolé est confondu avec le résultat exact alors que le calcul aliasé et la dérivation du champ filtré conduisent à des résultats totalement faux.

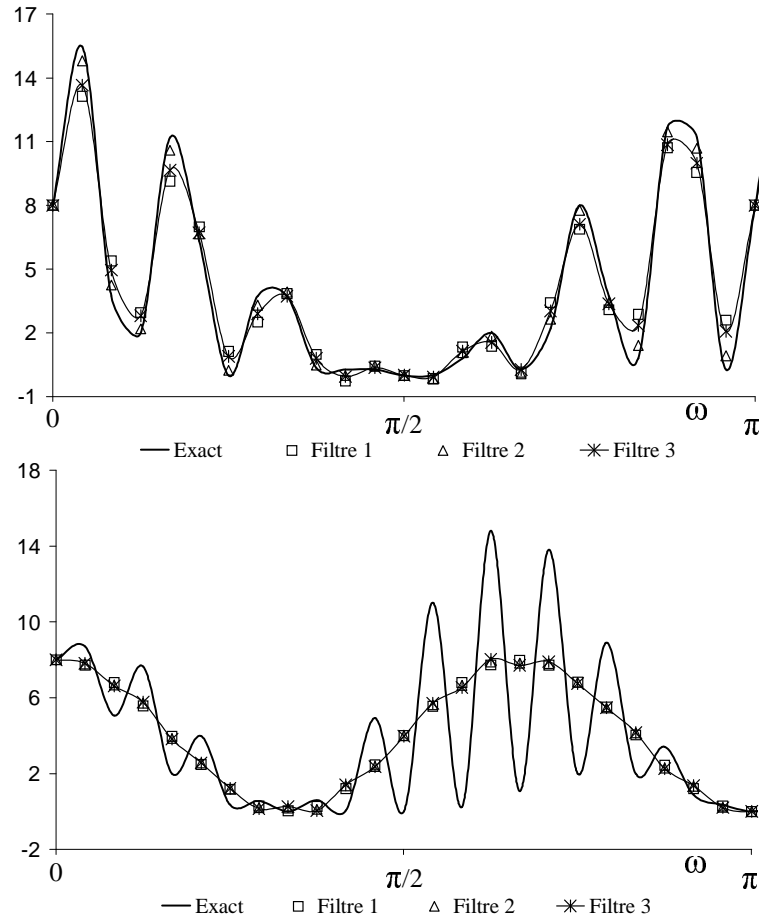


FIG. 5.15 – Filtrage de la convolution non aliasée (haut) et aliasée (bas) pour les trois filtres de la figure (5.8).

Tests dynamiques

Les tests dynamiques sont menés sur l'équation de Burgers visqueuse (5.12) avec les mêmes paramètres que précédemment (section 5.2.3). On dispose pour les comparaisons de la solution exacte obtenue par la transformation de Cole-Hopf.

La norme L^2 de l'erreur sert de critère d'exactitude :

$$\|u^N - u_{exact}\|_{L^2}(t) = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (u_i^N(t) - u_{exact}(x_i, t))^2 \right)^{1/2}$$

Les tests montrent que pour une valeur de $\nu = 0.01$, le spectre de la solution exacte remplit la moitié des nombres d'onde ($k = 32$) à $t \approx 0.45$ et atteint la coupure $k_c = 64$ à $t \approx 0.70$ avec une amplitude de $|\hat{u}_{exact}(k)| \approx 10^{-10}$.

On résout dans l'espace physique par méthode de différences finies compactes les équations (5.17), (5.15), (5.20) et (5.28). Les résultats de (5.17), (5.15) sont également donnés pour une méthode pseudo-spectrale aliasée ou non.

Lors de l'évolution initiale de la solution (fig. 5.17) seules les erreurs de discrétisation entrent en jeu. Les simulations spectrales donnent la solution exacte à la précision machine, l'effet du

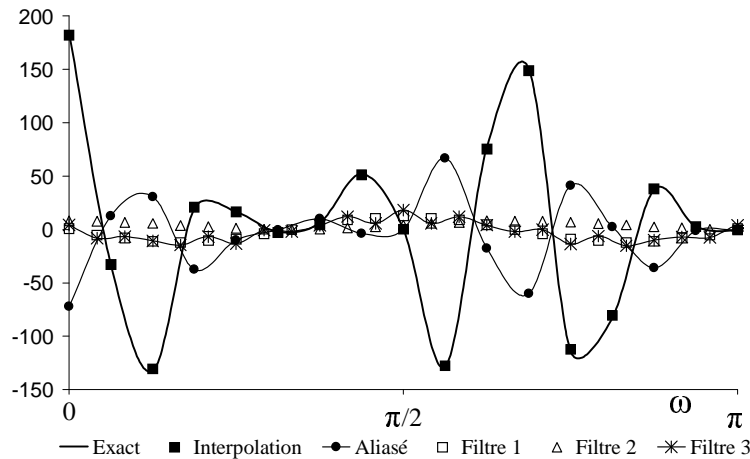


FIG. 5.16 – Comparaison statique du filtrage et de l’interpolation.

nombre d’onde modifié apparaît d’abord pour la forme divergente qui dérive deux fois le contenu spectral de la forme convective. Le filtrage sur grille fine $M = 3N/2$ et sur grille régulière $M = N$ produit un niveau d’erreur nettement plus élevé. La méthode d’interpolation se révèle être un bon compromis entre introduction d’erreurs dues à la fonction de transfert de l’interpolateur compact et augmentation du pouvoir de résolution de la dérivée.

A partir de $t \approx 0.45$ on entre dans la phase de résolution marginale, les produits deviennent aliasés et l’erreur de la forme convective commence à croître. Les erreurs d’aliasing des calculs spectraux sont quasi sans effet jusqu’à $t \approx 0.70$ où le champ commence à être sous résolu. Après $t \approx 0.70$ on continue à faire avancer des solutions numériques sous-résolues (fig. 5.18).

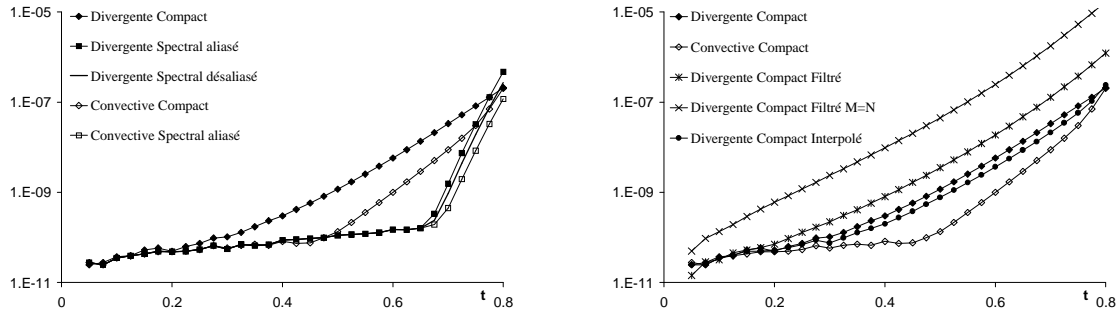


FIG. 5.17 – Évolution initiale de la norme L^2 de l’erreur pour les méthodes spectrales, compacts classiques (gauche) et compacts filtrées ou interpolées (droite).

Les méthodes spectrales (ou compacts) sous forme divergente sont les plus sévèrement touchées, les erreurs d’aliasing de la forme convective atténuent l’effet de sous-résolution. La technique de filtrage sur maillage fin ($M = 3N/2$), notée *Divergente Compact Filtré* sur la figure (5.18) s’en sort le mieux du fait de la densité supérieure de points de grilles qu’elle utilise. La méthode d’interpolation compact est proche de la forme convective.

Les solutions numériques à $t = 1.6$ sont représentées en figure (5.19). On notera là encore le bon accord entre les formes convective et divergente interpolée.

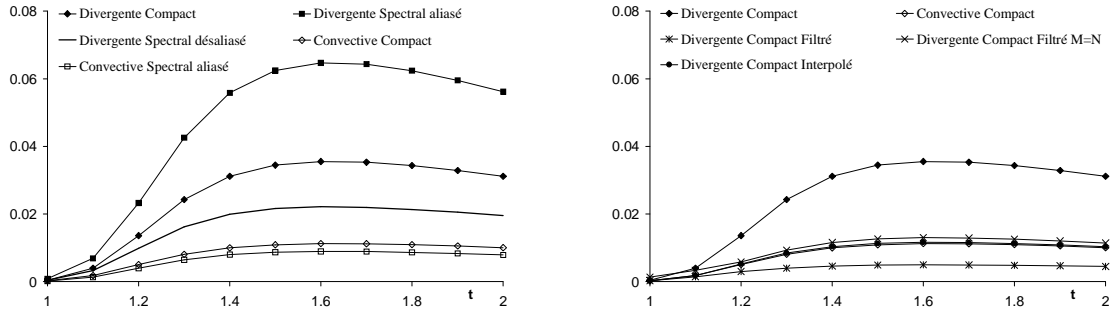


FIG. 5.18 – Évolution finale de la norme L^2 de l'erreur pour les méthodes spectrales et compact classiques (gauche), et compact filtrées ou interpolées (droite).

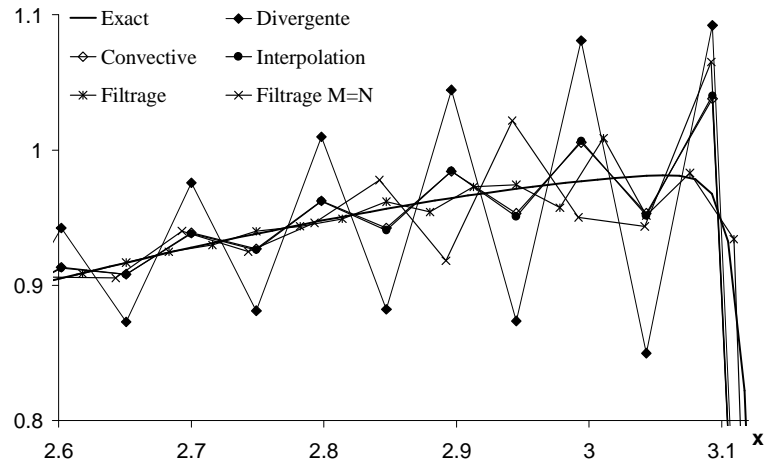


FIG. 5.19 – Comparaison dynamique du filtrage et de l'interpolation sur l'équation de Burgers visqueuse à $t=1.6$

Conclusion

On peut évaluer rapidement le surcoût numérique de ces deux méthodes. De manière générale tous les schémas compacts ont une formulation similaire qui conduit à un système matriciel pouvant être inversé en $O(N)$ opérations. Les dérivations première et seconde de (5.12) nécessitent ainsi $O(2N)$ opérations.

Pour le filtrage, on ne travaille plus sur N , mais $M = 3N/2$ points. La discrétisation spatiale de (5.20) requiert alors $2O(3N/2)$ opérations plus $O(3N/2)$ pour le filtrage et un surcoût de $O(N/2)$ pour le produit. La méthode de Ghosal conduit donc à un surcoût de $O(3N)$ opération par itération, associé à une réduction du pas de temps de l'ordre de $2/3$ compte tenu de la condition de CFL.

L'interpolation nécessite $O(N)$ opérations par champ, soit $O(2N)$ pour former le terme non linéaire (ici $u = v$, mais dans le cas général on n'a pas forcément cette égalité). La dérivation est alors en $O(2N)$ et le produit rajoute $O(N)$ opérations. Le surcoût total est en $O(4N)$, supérieur à la méthode de filtrage, mais le pas de temps reste ici inchangé. Globalement ces deux méthodes ont donc un coût algorithmique équivalent.

D'un point de vue théorique la méthode d'interpolation est meilleure que le filtrage pour rendre la forme divergente quasiment exacte aux points de grille et donc équivalente à la forme convective dans l'espace physique. Néanmoins, en pratique, l'interpolation est limitée à des problèmes suffisamment réguliers, alors qu'en choisissant correctement le filtre on peut s'assurer de la stabilité et de la réduction des oscillations de la solution numérique au détriment de la qualité de précision de celle-ci [98].

5.5 Erreur numérique et modèle sous-maille

Les études menées dans la section précédente ont montré que l'utilisation de la forme divergente, pour la résolution d'équations aux dérivées partielles non linéaires avec des méthodes numériques à haut pouvoir de résolution, peut conduire à d'importantes erreurs du fait de l'aliasing statique. La forme convective possède par contre un meilleur comportement en cas de résolution marginale. La résolution marginale, résolution à partir de laquelle l'erreur d'aliasing apparaît, peut être repoussée en SND pourvu que le maillage soit suffisamment fin. Par contre, en SGE, les champs simulés présentant un contenu spectral chargé, l'erreur d'aliasing est forcément présente. Enfin, on a vu que l'on pouvait utiliser la notion de nombre d'onde modifié, et effectuer des calculs avec un code pseudo-spectral, pour imiter le comportement d'un schéma implémenté dans l'espace physique, pourvu que les calculs soient aliasés.

Dans cette section on regarde plus en détail l'effet de la formulation du terme non linéaire sur la physique de l'écoulement en simulation des grandes échelles. Les études sont menées d'abord en approche statique, sur des champs de vitesse réalistes, puis en dynamique sur la SGE d'une THI en auto-amortissement à résolution 48^3 .

5.5.1 Bases de l'étude

On considère un domaine cubique de volume $(L = 2\pi)^3$ muni de la base orthonormale $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ et discrétisé en $N = 48$ points dans chaque direction d'espace. On suppose de plus que l'écoulement est homogène et isotrope en moyenne.

On s'intéresse à deux méthodes de discrétisation spatiale aux différences finies (de nom générique *FD*) notées :

- **DF2** pour différences finies centrées d'ordre 2.
- **SL4** pour différences finies compactes centrées d'ordre 4 avec 80% de pouvoir de résolution à 0.1% d'erreur relative.

Les méthodes de référence sont notées :

- **SPDA** pour méthode de collocation Fourier désaliasée.
- **SP** pour méthode de collocation Fourier aliasée.

Méthodologie

La comparaison des erreurs de troncature et d'aliasing statique des différentes formulations du terme non linéaire des équations de Navier-Stokes 3D est menée sur la base de spectres d'erreur comme en [34]. Supposons que $\widehat{G}_i^{REF}(\vec{k})$ soit la $i^{ème}$ composante spectrale d'un vecteur de référence et $\widehat{G}_i^{TEST}(\vec{k})$ son *avatar* obtenu par une méthode numérique quelconque. On évalue alors en tout nombre d'onde la différence :

$$\Delta_{\widehat{G}_i}^{REF-TEST} = \widehat{G}_i^{REF}(\vec{k}) - \widehat{G}_i^{TEST}(\vec{k})$$

et on calcule le spectre d'erreur au mode k par intégration sur les sphères A_k de rayon k , en moyennant sur les directions d'espace $i = 1, 2, 3$ puisque l'homogénéité et l'isotropie sont supposées.

$$E_{\widehat{G}}^{REF-TEST}(k) = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{4\pi k^2} \int_{A_k} \left| \Delta_{\widehat{G}_i}^{REF-TEST}(\vec{k}) \right| dA_k$$

Champ initial

Afin d'effectuer des calculs réalistes, on impose au spectre d'énergie de suivre la théorie de Kolmogorov [30]. Pour cela on suppose que ce spectre présente une zone infrarouge en k^4 , un pic à k_I et une zone inertielle en $k^{-5/3}$ jusqu'à la coupure k_c :

$$E(k) = \begin{cases} k^4 & \text{si } 0 \leq k \leq k_I \\ k^{-5/3} & \text{si } k_I \leq k \leq k_c \end{cases} \quad (5.29)$$

Les champs de vitesse sont alors déduits en introduisant la fonction de courant vectorielle :

$$\widehat{u}_i(\vec{k}) = j_c k_j \varepsilon_{ijk} \widehat{\Psi}_k(\vec{k}) \quad (5.30)$$

avec

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } ijk \text{ sont en permutation circulaire directe} \\ -1 & \text{si } ijk \text{ sont en permutation circulaire inverse} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On relie $E(k)$ à \vec{u} par la relation (4.4) qui devient ici, en introduisant le complexe conjugué du champ de vitesse (réel) $\widehat{u}_i^*(\vec{k}) = \widehat{u}_i(-\vec{k})$:

$$E(k) = 2\pi k^2 \langle \widehat{u}_i \widehat{u}_i^* \rangle = 2\pi k^2 \left\langle (1 - \delta_{jk}) \left(k_j k_j \widehat{\Psi}_k \widehat{\Psi}_k^* - k_j k_k \widehat{\Psi}_k \widehat{\Psi}_j^* \right) \right\rangle \quad (5.31)$$

La fonction de courant est construite à partir de son spectre :

$$\widehat{\Psi}_i(\vec{k}) = \Psi_i(k) e^{j_c \theta_i(\vec{k})}$$

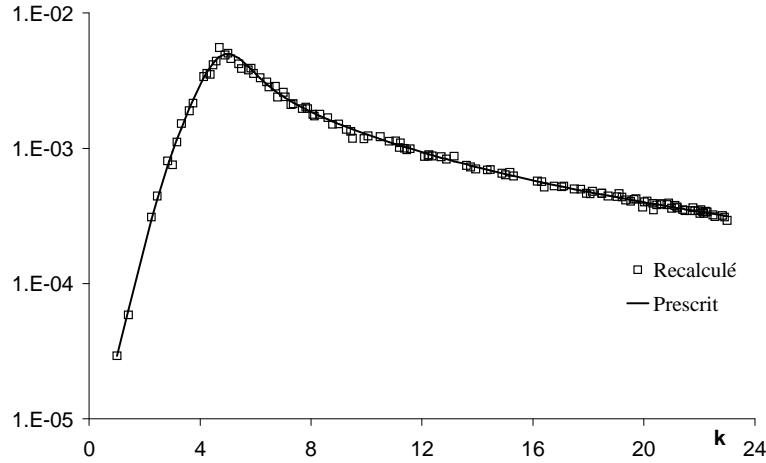
où $\theta_i(\vec{k})$ prend des valeurs aléatoires sur l'intervalle $[0, 2\pi]$ et :

$$\Psi_i(k) = \left(\frac{E(k)}{4\pi k^4} \right)^{1/2}$$

On vérifie *a posteriori* que le spectre d'énergie prescrit (5.29) et le spectre recalculé (5.31) sont cohérents (fig. 5.20) et que la densité de probabilité associée est gaussienne.

5.5.2 Équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes projetées dans l'espace spectral ont été introduites en section (3.1.2).


 FIG. 5.20 – Comparaison des spectres d'énergie prescrits et recalculés pour $k_I = 6$ et $N = 48$.

Terme non linéaire

Le terme non linéaire peut s'exprimer sous plusieurs formes que l'on rappelle ici :

$$N_i^1 = (u_i u_j)_{,j} \quad : \text{forme divergente} \quad (5.32)$$

$$N_i^2 = u_{i,j} u_j + u_i u_{j,j} \quad : \text{forme convective} \quad (5.33)$$

$$N_i^3 = \frac{1}{2} (N_i^1 + N_i^2) \quad : \text{forme skew-symétrique} \quad (5.34)$$

$$N_i^{41} = \varepsilon_{ijk} (\omega_k u_j) + \frac{1}{2} (u_j u_j)_{,i} \quad : \text{forme rotationnelle n}^\circ 1 \quad (5.35)$$

$$N_i^{42} = \varepsilon_{ijk} (\omega_k u_j) + u_{i,j} u_j \quad : \text{forme rotationnelle n}^\circ 2 \quad (5.36)$$

$$\omega_k = \varepsilon_{klm} u_{m,l}$$

Seules N^2 et N^{42} sont exactes aux points de grille dans l'espace physique, les autres formes sont affectées par la grille discrète.

On rappelle que l'étude pseudo-spectrale des erreurs numériques introduites par les schémas aux différences finies dans l'espace physique nécessite l'utilisation d'un code aliasé.

Projection biaisée

Le nombre d'onde modifié est introduit dans la représentation spectrale des équations de Navier-Stokes en supposant que le champ de vitesse est réellement indivergent (à la précision machine). Ainsi, seule l'équation de la dynamique est modifiée par rapport à (1.18)(1.15) :

$$j_c k_i \hat{u}_i = 0 \quad (5.37)$$

$$\hat{u}_{i,t} + \hat{N}'_i = -j_c k_i P' - \nu k'' \hat{u}_i \quad (5.38)$$

\hat{N}'_i est la représentation spectrale de l'écriture générique du terme non linéaire (5.32)–(5.36) et P' le projecteur "biaisé" :

$$P'_{ij}(\vec{k}) = \delta_{ij} - \frac{k'_i k_j}{k'_l k_l} \quad (5.39)$$

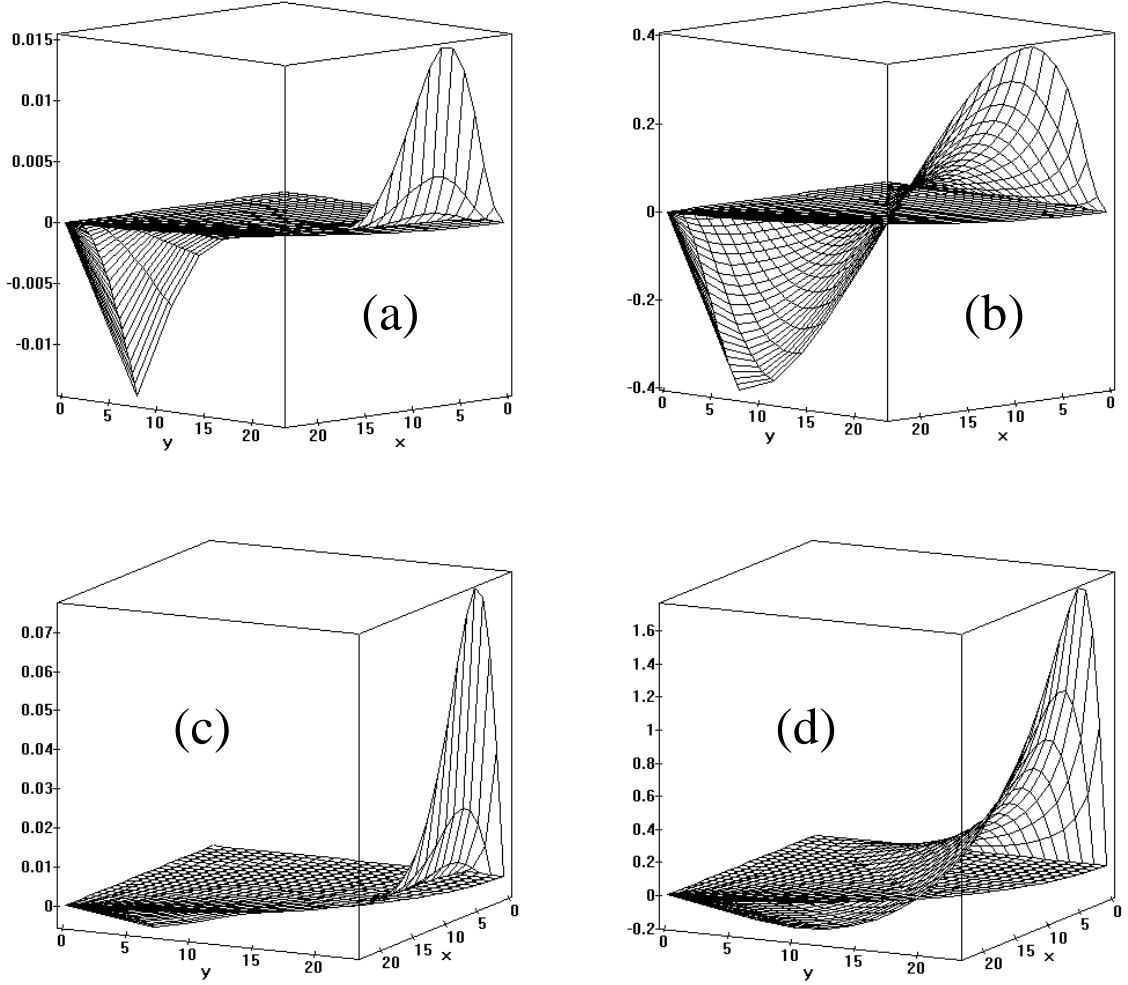


FIG. 5.21 – Écart entre le projecteur spectral (1.21) et le projecteur biaisé (5.39).
 (a) terme diagonale pour **SL4**. (b) terme diagonale pour **DF2**.
 (c) terme hors-diagonale pour **SL4**. (d) terme hors-diagonale pour **DF2**.

La différence entre les tenseurs de projection spectrale (1.21) et biaisé (5.39) est présentée en figure (5.21) pour les schémas **DF2** et **SL4** dans le cas bidimensionnel pour plus de simplicité. Plus le pouvoir de résolution du schéma est bas et plus l'écart au projecteur spectral est important, à la fois en amplitude et en terme de nombre d'onde. On note une symétrie pour les termes diagonaux P'_{11} et P'_{22} : amplification dans une direction et atténuation dans l'autre (fig. 5.21 (a) et (b)), alors que les termes hors-diagonale P'_{12} et P'_{21} sont totalement asymétriques (fig. 5.21 (c) et (d)).

Sur la base du projecteur biaisé, le formalisme de SGE spectral (4.2) devient :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\nu + \nu^t(k|k_c)) k'' \right] \bar{u}_i = t_{i, < k_c} \quad (5.40)$$

avec

$$t_{i, < k_c}(\vec{k}, t) = -j_c k_j P'_{ij}(\vec{k}) \widehat{N}'_l(\vec{k}, t) \quad (5.41)$$

5.5.3 Analyse terme à terme

Chacun des termes de (5.40) est analysé à partir du champ statique (5.30) obtenu pour $k_I = 6$. On étudie l'erreur d'aliasing seule, de troncature seule, et l'erreur globale, comme précisé en table (5.1). Pour plus de lisibilité, toutes les figures suivantes sont à la même échelle.

	Aliasing seul	Troncature seule	Erreur globale
N^1	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{SP}^1$	$\widehat{N}_{SP}^1 - \widehat{N}_{FD}^1$	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{FD}^1$
N^2	0	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{FD}^2$	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{FD}^2$
N^3	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{SP}^3$	$\widehat{N}_{SP}^3 - \widehat{N}_{FD}^3$	$\widehat{N}_{SP}^2 - \widehat{N}_{FD}^3$
N^{41}	$\widehat{N}_{SP}^{42} - \widehat{N}_{SP}^{41}$	$\widehat{N}_{SP}^{41} - \widehat{N}_{FD}^{41}$	$\widehat{N}_{SP}^{42} - \widehat{N}_{FD}^{41}$
N^{42}	0	$\widehat{N}_{SP}^{42} - \widehat{N}_{FD}^{42}$	$\widehat{N}_{SP}^{42} - \widehat{N}_{FD}^{42}$

TAB. 5.1 – Procédure pour l'étude des erreurs numériques 3D

Termes convectifs

Pour une analyse spectrale pure (hors problème de troncature), les erreurs d'aliasing seules sont caractérisées en prenant la forme spectrale désaliasée pour référence ($E_{\widehat{N}}^{\text{SPDA-SP}}(k)$) (fig. 5.22). La forme rotationnelle n°1 (N^{41}), basée sur la forme divergente (N^1), produit le plus grand écart. La forme skew-symétrique (N^3) est la plus efficace, les erreurs d'aliasing des formes divergente (N^1) et convective (N^2) se compensant comme mentionné par Kravchenko [50]. Néanmoins, dans l'espace physique, on a montré en section (5.2) que la référence est la forme convective (N^2). La figure de droite (fig. 5.22) montre le spectre de l'erreur d'aliasing présente dans l'espace physique pour les différentes formes (voir la table 5.1).

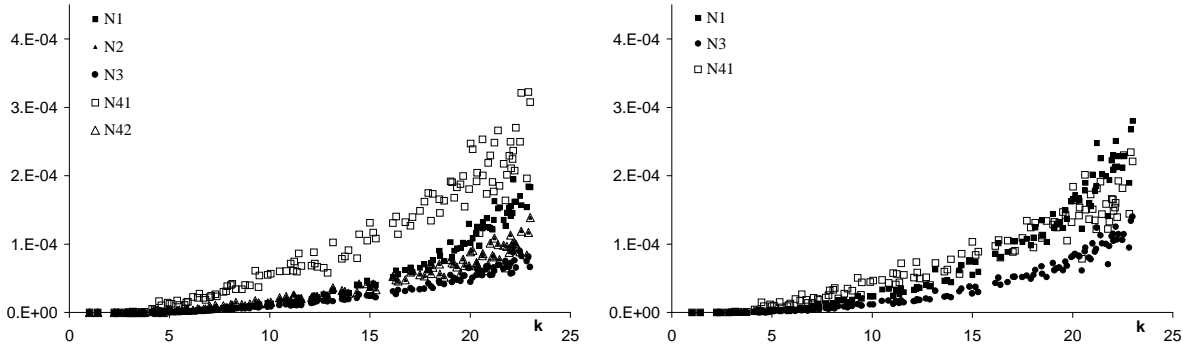
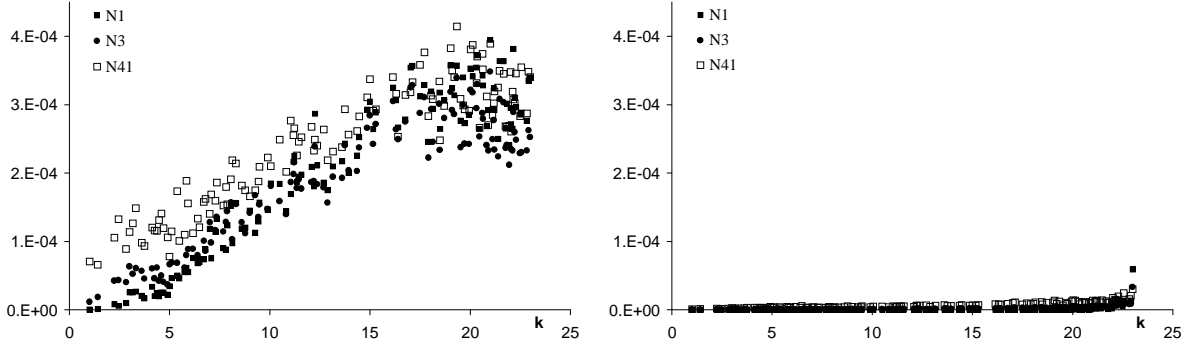


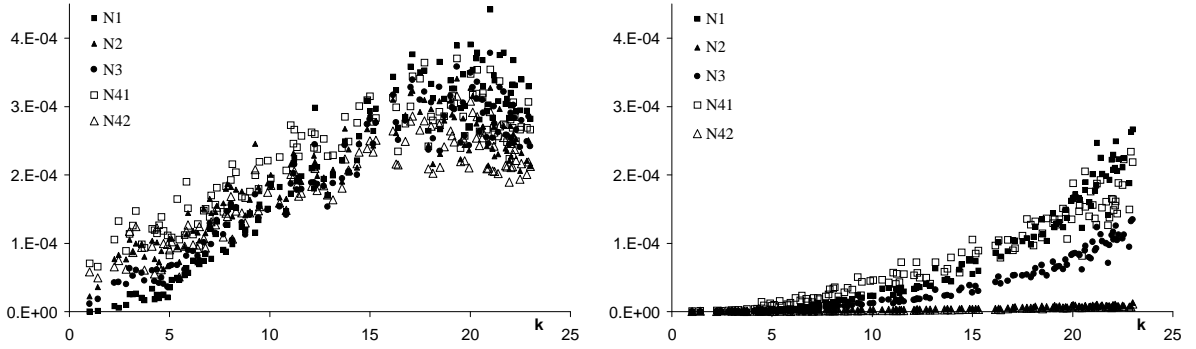
FIG. 5.22 – Aliasing 3D spectral (gauche), et en référence à N^2 (droite), pour les différents termes non linéaires (5.32)–(5.36).

Les erreurs de troncature seules pour **DF2** et **SL4** sont représentées en figure (5.23). Comme prévu, l'erreur de troncature pour **DF2** est supérieure à celle de **SL4** et les formes de ces spectres sont peu sensibles au choix de l'écriture du terme non linéaire.

Maintenant, en combinant les deux erreurs précédentes (cf table 5.1) on obtient le spectre d'erreur globale (fig. 5.24). L'erreur globale est principalement due à la troncature pour le schéma à faible pouvoir de résolution (**DF2**), alors que l'aliasing est le plus important pour le schéma

FIG. 5.23 – Erreur de troncature 3D seule pour les schémas **DF2** (gauche) et **SL4** (droite).

à haut pouvoir de résolution (**SL4**). Le couple (N^2 , **SL4**) donne les meilleurs résultats, et (N^1 , **DF2**) les moins bons.

FIG. 5.24 – Erreur globale 3D pour les schémas **DF2** (gauche) et **SL4** (droite).

Transfert spectral

L'élimination de la pression dans les équations de Navier-Stokes (5.38) a introduit un couplage entre le projecteur biaisé et le terme non linéaire. Le terme de transfert spectral résolu, moyenné sur les sphères A_k de rayon k , (5.41) est tracé en figure (5.25) pour la forme convective (N^1) en association avec les schémas **SPDA**, **SP**, **DF2**, **SL4**. Le faible pouvoir de résolution de **DF2** réduit les transferts dans la zone inertielle et diminue la production de modes à haute fréquence. A l'inverse, le schéma compact est très proche de la méthode spectrale et n'atténue que légèrement les modes au voisinage de la coupure. On n'a pas représenté les résultats pour les autres formes du terme non linéaire car ils sont très proches de ceux obtenus en figure (5.25).

Dissipation visqueuse et sous-maille

Le terme diffusif $(\nu + \nu^t(k|k_c)) k'' \widehat{u}_i(\vec{k}, t)$ est principalement gouverné par les interactions entre le modèle sous-maille et les erreurs de dérivation *via* le produit $\nu^t k''$. On a représenté en figure (5.26) ce terme pour les schémas **DF2**, **SL4** et **SP** et pour une viscosité turbulente de type plateau-pic (équation 4.6) ou constante. Le schéma **DF2** avec modèle plateau-pic se

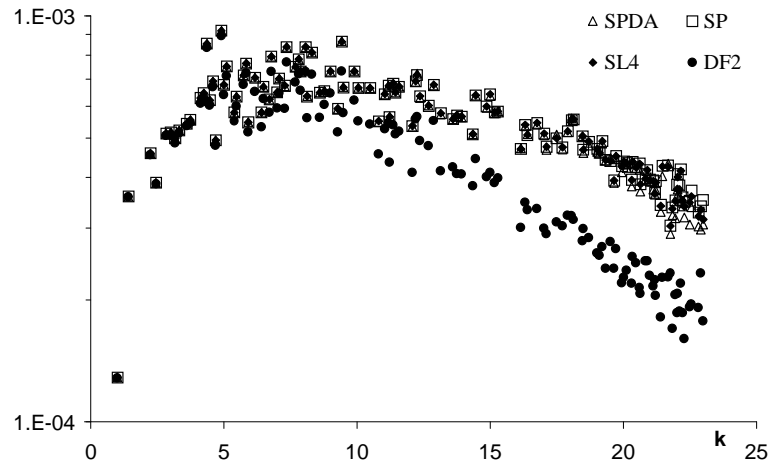


FIG. 5.25 – Spectre du transfert spectral (5.41) pour la forme divergente N^1 .

comporte globalement comme un schéma spectral ou compact associé à une viscosité turbulente sous-maille constante.

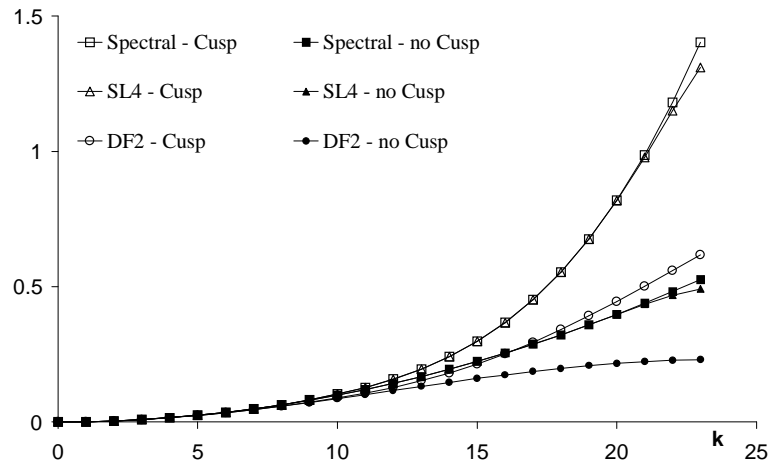


FIG. 5.26 – Terme $\nu^t k''$ associé au terme sous-maille pour les schémas **DF2** et **SL4**.

Le terme diffusif complet est tracé en figure (5.27). Le schéma compact est quasiment confondu avec la méthode spectrale sur toute la gamme de nombre d'onde. Le schéma centré d'ordre 2 est proche de la forme spectrale jusqu'à $k_c/2$ environ puis se situe entre le modèle spectral à viscosité turbulente constante et dynamique.

Erreur totale et terme sous-maille

L'erreur totale est la somme des erreurs accumulées sur les termes de transfert et de dissipation. On la calcule selon la procédure définie en table (5.1).

Le schéma **SL4**, compact d'ordre 4, possède une très faible erreur de troncature et fait ressortir les effets d'aliasing des formes N^1 , N^3 et N^{41} dont l'amplitude est comparable à celle du terme sous-maille (fig. 5.28). Parmi les formes précédentes, la forme skew-symétrique (N^3) est celle qui s'en sort le mieux. Les formulations N^2 et N^{42} , exactes aux points de grille réduisent de manière

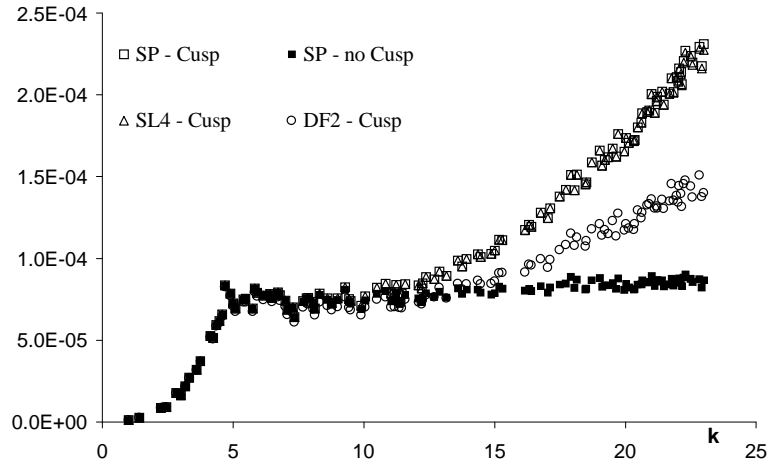
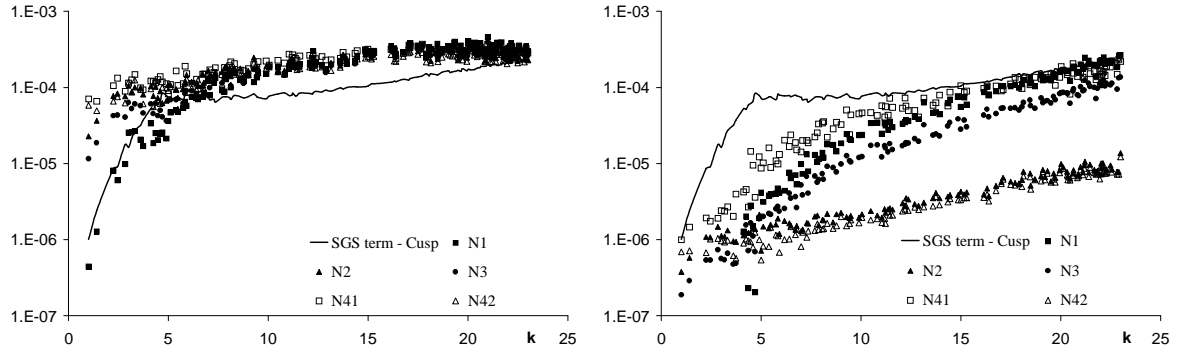


FIG. 5.27 – Terme sous-maille pour différents schémas.

notable l'erreur totale sur toute la gamme de nombre d'onde. Le modèle sous-maille n'est plus pollué par la formulation numérique.

Pour le schéma **DF2**, les erreurs de troncature dépassent la contribution du terme sous-maille sur toute la plage de nombre d'onde, quelle que soit la forme du terme non linéaire. La contribution du modèle est noyée dans les erreurs numériques et son effet devient incertain.

FIG. 5.28 – Erreur totale comparée au terme sous-maille pour les schémas **DF2** (gauche) et **SL4** (droite).

5.5.4 Étude dynamique 3D

Les tests statiques précédents ont montré que la contribution du terme sous-maille peut facilement être masquée par les erreurs numériques. Si l'ordre de la méthode est bas il s'agit d'erreurs de troncature et d'erreurs d'aliasing pour une méthode d'ordre supérieur. Dans cette section on s'intéresse au comportement dynamique des erreurs. Pour cela on effectue la SGE d'une turbulence homogène isotrope en auto-amortissement à la résolution de 48^3 pour les formes N^1 et N^2 .

Code de calcul

Le calcul de référence, obtenu avec une méthode pseudo-spectrale désaliasée (**SPDA**), permet d'effectuer des comparaisons avec les schémas **DF2** et **SL4**, sur la base de l'évolution temporelle de l'énergie cinétique et des spectres d'énergie. On rappelle que le comportement physique de ces schémas est émulé dans l'espace spectral en considérant un calcul aliasé où est introduit le nombre d'onde modifié.

Le code, initialement développé par Fedioun [30], utilise un avancement en temps d'Adams-Bashforth du second ordre (AB2) et un schéma implicite de Cranck-Nicolson pour les termes diffusifs.

Le champ initial est obtenu par la méthode détaillée en section (5.5.1), où cette fois-ci le spectre d'énergie pique à $k_I = 8$ et présente une zone infrarouge k^n avec $n = 8$:

$$E(k, 0) = Ak^n e^{-4(k/k_I)^2}$$

En choisissant de normaliser l'énergie cinétique : k_0 à 1, la constante A devient :

$$A^{-1} = \frac{1}{2} \left(\frac{4}{k_I^2} \right)^{-(n+1)/2} \Gamma \left(\frac{n+1}{2} \right)$$

Le temps de référence est basé sur le temps de retournement des grosses structures : $t_{ref} = \left(k_0^{1/2} k_I \right)^{-1}$

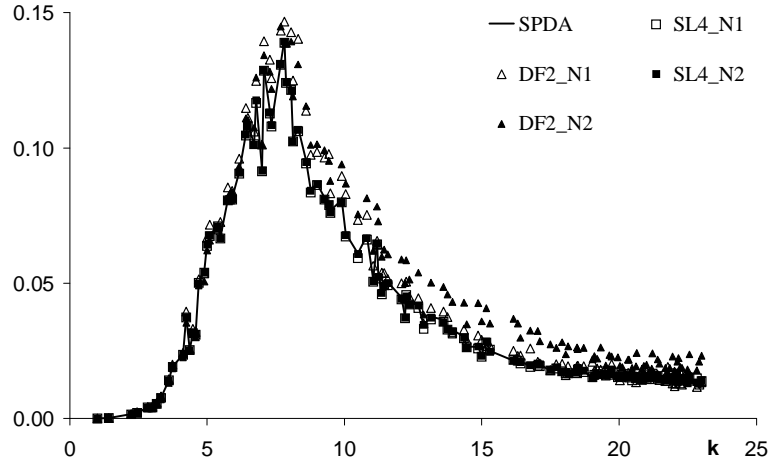


FIG. 5.29 – Spectre d'énergie à $t=2$ pour les schémas **DF2** et **SL4** et les formes N^1 et N^2 .

Premiers retournements

Une des propriétés du modèle sous-maille dynamique (4.6) est d'être inactif tant que le spectre d'énergie n'est pas chargé à la coupure. On peut ainsi évaluer la stabilité de la discrétisation et l'émergence de la cascade énergétique, indépendamment du modèle sous-maille. Le spectre d'énergie à $t = 2$ est tracé en figure (5.29). On constate une amplification des modes sur une large bande de nombres d'onde pour le schéma **DF2**, quelle que soit la forme du terme non linéaire.

Cette instabilité est également visible sur l'évolution initiale de l'énergie cinétique qui devrait

théoriquement être conservée en l'absence de dissipation (fig. 5.30). C'est le cas pour **SPDA** alors que **DF2** (sous forme N^1 ou N^2) conduit à une amplification de l'énergie cinétique, signe d'instabilité, alors que la méthode **SL4/AB2** est légèrement dissipatif, tendance également observée par krachvenko ([50]).

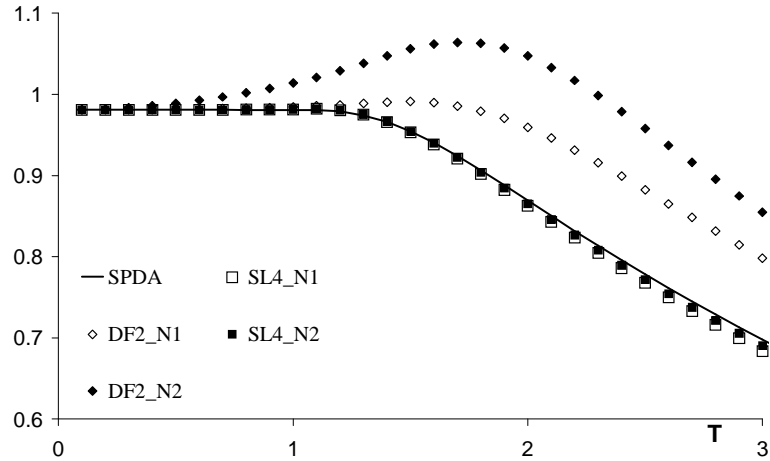


FIG. 5.30 – Évolution initiale de l'énergie cinétique pour les schémas **DF2** et **SL4**, et les formes N^1 et N^2 .

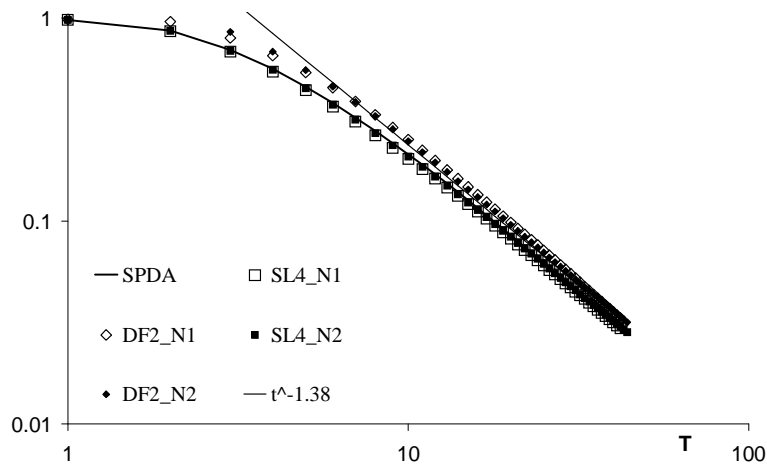


FIG. 5.31 – Évolution temporelle de l'énergie cinétique pour les schémas **DF2** et **SL4**, et les formes N^1 et N^2 .

Cascade établie

Vers $t = 2.5$ le modèle sous-maille devient actif et le terme diffusif ainsi introduit stabilise **DF2**. **SL4** sous forme N^1 ou N^2 est très proche de **SPDA** et vers $t = 10$ ces méthodes suivent une loi de décroissance en $t^{-1.38}$ prévue par la théorie [78](fig. 5.31). Outre le fait de stabiliser le calcul, le modèle sous-maille dynamique semble s'adapter aux erreurs numériques du schéma puisque **DF2** tend lui aussi de manière asymptotique vers la bonne loi de décroissance.

Ces comportements sont confirmés sur le spectre d'énergie, tracé à $t = 40$ en figure (5.32), puisque **SPDA** et **SL4**/ N^2 ont des spectres très proches (**SL4**/ N^1 est légèrement moins bon) avec une évolution en $k^{-5/3}$ au voisinage de la coupure. En fait légèrement inférieure ($-5.7/3$), en accord avec les calculs à résolution supérieure (64^3 et 128^3) reportés par Lesieur [60]. **DF2** présente également un spectre en $k^{-5/3}$ mais avec un niveau énergétique supérieur (comportement dispersif), là encore le modèle sous-maille a un effet stabilisateur et permet de rétablir la physique du processus simulé.

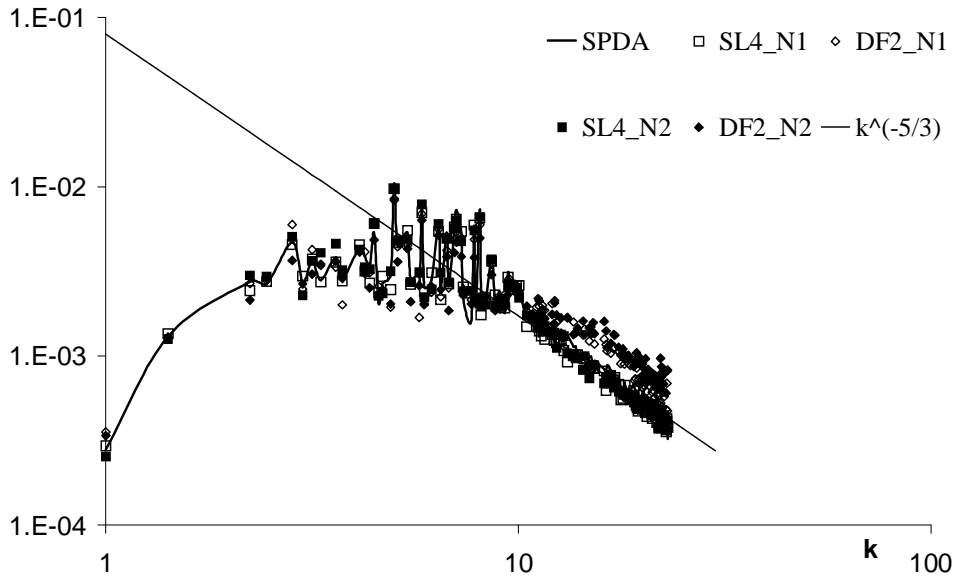


FIG. 5.32 – Spectre d'énergie à $t=40$ pour les schémas **DF2** et **SL4**, et les formes N^1 et N^2 . Échelle logarithmique.

5.6 Conclusion

Ce long chapitre a été consacré à l'identification et à l'étude des erreurs numériques intervenant lors de la résolution numérique des équations de Navier-Stokes. Sur des cas tests statiques réalistes on a montré que l'erreur principale est de type troncature pour un schéma à faible pouvoir de résolution, alors qu'elle est due à l'aliasing lorsque le pouvoir de résolution est élevé. Dans le cas d'une SGE ces erreurs peuvent être supérieures à l'amplitude du terme sous-maille. En pratique cependant, un modèle dynamique semble s'adapter aux erreurs numériques et conduire à des statistiques correctes.

Contrairement aux résultats trouvés dans la littérature, nous avons fait le *distinguo* entre aliasing physique et spectral. Ceci nous permet de conclure que la forme convective du terme non linéaire des équations de Navier-Stokes est celle qui minimise les erreurs numériques lors des calculs avec méthode compacte. On s'est assuré de la validité de ce résultat sur la SND d'une couche de mélange temporelle plane et la SGE d'une THI en auto-amortissement. Il ressort de cette étude que la forme convective (N^2), associée à un schéma compact (**SL4**), possède des propriétés très proches d'une méthode spectrale désaliasée, à un coût nettement moindre. Enfin, on a proposé une méthode d'interpolation afin de rendre la formulation divergente numériquement proche de la forme convective, à un coût de calcul acceptable.

Chapitre 6

Le code COMPACT

La simulation numérique directe des équations de Navier-Stokes nécessite de résoudre de la manière la plus propre possible une large gamme de nombres d'onde. Pour cela, deux approches sont possibles :

- utiliser un schéma à faible pouvoir de résolution associé à un maillage suffisamment fin pour s'assurer que la gamme d'échelles d'intérêt se trouve dans la plage de nombres d'onde correctement résolue,
- utiliser un schéma à haut pouvoir de résolution qui réduit le nombre de points nécessaires mais augmente la complexité du code.

Une SND étant par définition un calcul instationnaire et tridimensionnel, nous avons choisi la deuxième approche afin de réduire le coût numérique des simulations. Les schémas compacts, présentés dans le chapitre précédent, ont ainsi été retenus et ont donné leur nom au code de calcul : code COMPACT.

Ce code est destiné à la réalisation des simulations nécessaires à la classification des termes sous-maille issus des équations filtrées du mélange binaire (3.18) (3.19) (3.23) (3.34).

6.1 Formulation mathématique

On se limite à des géométries simples, de type parallélépipédique, en repère cartésien.

6.1.1 Équations

Le chapitre 5, consacré à l'étude des erreurs numériques, a montré que l'utilisation de la forme convective du terme non linéaire des équations de transport réduit les erreurs d'aliasing dans l'espace physique. De plus, la formulation en variables naturelles (ou primitives) (1.8) – (1.11) permet une réduction du nombre d'opérations par pas de temps.

Adimensionnement

Les équations sont adimensionnées par les grandeurs de référence indicées $_{ref}$:

$$\begin{array}{lll}
 x_i^* = x_i \cdot L_{ref} & t^* = t \cdot t_{ref} & u^* = u \cdot U_{ref} \\
 \rho^* = \rho \cdot \rho_{ref} & T^* = T \cdot T_{ref} & p^* = p \cdot p_{ref} \\
 r^* = r \cdot r_{ref} & C_p^* = C_p \cdot C_{p_{ref}} & C_v^* = C_v \cdot C_{v_{ref}} \\
 \mu^* = \mu \cdot \mu_{ref} & k^* = k \cdot k_{ref} & D^* = D \cdot D_{ref}
 \end{array}$$

où * désigne la grandeur dimensionnée. Ces paramètres d'adimensionnement sont reliés entre eux par :

$$\begin{aligned}
 t_{ref} &= \frac{L_{ref}}{U_{ref}} & \rho_{ref} &= \frac{p_{ref}}{r_{ref} T_{ref}} \\
 p_{ref} &= \rho_{ref} U_{ref}^2 & r_{ref} &= C_{p_{ref}} = C_{v_{ref}} = \frac{U_{ref}^2}{T_{ref}} \\
 \mu_{ref} &= \frac{1}{2} (\mu_1 + \mu_2) & Re_{ref} &= \frac{\rho_{ref} U_{ref} L_{ref}}{\mu_{ref}} \\
 Pr_{ref} &= \frac{\mu_{ref} C_{p_{ref}}}{k_{ref}} & Sc_{ref} &= \frac{\mu_{ref} \rho_{ref}}{D_{ref}}
 \end{aligned}$$

Ici, μ_1 et μ_2 sont les viscosités partielles des fluides 1 et 2 calculées dans des conditions à définir. Re_{ref} , Pr_{ref} et Sc_{ref} sont respectivement les nombres de Reynolds, de Prandtl et de Schmidt basés sur les grandeurs de référence.

Sous forme adimensionnelle, le système résolu, (1.8) – (1.11), devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} = 0 \quad (6.1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned}
 \rho C_v \left[\frac{\partial T}{\partial t} + u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} &= \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{k}{Re_{ref} Pr_{ref}} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\
 &- (C_{p1} - C_{p2}) J_j \frac{\partial T}{\partial x_j} - (r_1 - r_2) T \frac{\partial J_j}{\partial x_j}
 \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\rho \left[\frac{\partial Y}{\partial t} + u_j \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial J_j}{\partial x_j} \quad (6.4)$$

avec,

$$\begin{aligned}
 p &= \rho (r_2 + (r_1 - r_2) Y) T \\
 \sigma_{ij} &= \frac{\mu}{Re_{ref}} \left[-\frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] \\
 J_j &= - \frac{\rho D}{Re_{ref} Sc_{ref}} \frac{\partial Y}{\partial x_j}
 \end{aligned}$$

Métriques

Le prototype d'écoulement d'intérêt pour notre étude est la couche de mélange qui possède une zone de cisaillement génératrice d'instabilités (cf partie suivante). Afin de résoudre ce gradient avec un maximum de précision, on introduit une transformation géométrique sur le maillage selon la direction perpendiculaire à l'écoulement, notée z . On relie la coordonnée physique z à la coordonnée mathématique Z par une fonction bijective f . En pratique, nous avons choisi un maillage en racine :

$$\begin{aligned}
 z &= L \frac{Z}{\sqrt{1 - Z^2}} \\
 z \in [z_{min} ; z_{max}] & \quad ; \quad Z \in]-1 ; 1[
 \end{aligned}$$

Les dérivées première et seconde sont calculées par la règle de dérivation composée :

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial Z} \frac{dZ}{dz}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \left(\frac{dZ}{dz} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}$$

Des tests numériques ont montré qu'un rapport de dilatation de l'ordre de 3 entre la plus grande et la plus petite maille est acceptable. Au-delà, des oscillations sur la pression peuvent être visibles, les gradients étant mal résolus aux frontières.

6.1.2 Conditions aux limites

Les conditions aux limites d'un code de calcul ont un double rôle :

- un rôle physique : définir la nature des frontières (glissement, sortie libre, ...)
- un rôle numérique : éviter les formulations instables aux frontières (downwind).

Les méthodes basées sur une analyse caractéristique 1D suivant la direction perpendiculaire à la frontière remplissent ces critères. Initialement développées par Thompson [105] pour le système Euler compressible, elles ont été étendues aux équations de Navier-Stokes par Poinso et Lele [81], puis par Baum et al [5] au cas multi-espèces.

Le principe de la méthode est rappelé ici pour la direction x . Partant du système à résoudre sous forme vectorielle :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \vec{C} = 0$$

On exhibe la matrice jacobienne A du flux F :

$$[A]_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial u_j}$$

que l'on diagonalise grâce aux matrices de vecteurs propres gauche et droit, $[S]^{-1}$ et $[S]$:

$$[\Lambda] = [S]^{-1} [A] [S]$$

pour former le vecteur caractéristique $\vec{\mathcal{L}}$:

$$\vec{\mathcal{L}} = [A] [S]^{-1} \frac{\partial \vec{U}}{\partial x}$$

Les ondes qui sortent du domaine sont calculées naturellement, alors que l'évolution des ondes entrantes est fixée ou reliée aux autres par le système LODI (Local One Dimension Inviscid) :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + [S] \vec{\mathcal{L}} = 0$$

Avec les notations employées, le vecteur inconnu s'exprime comme :

$$\vec{U} = [\rho, u, v, w, T, Y]^T$$

et le vecteur caractéristique selon x est :

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_1^x &= \frac{u-c}{2\rho C_p} \left[\frac{\partial p}{\partial x} - \rho c \frac{\partial u}{\partial x} \right] \\ \mathcal{L}_2^x &= u \frac{\partial v}{\partial x} \\ \mathcal{L}_3^x &= u \frac{\partial w}{\partial x} \\ \mathcal{L}_4^x &= \frac{u}{\rho C_p} \left[-\frac{\partial p}{\partial x} + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial x} \right] \\ \mathcal{L}_5^x &= u \left[\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial x} \right] \\ \mathcal{L}_6^x &= \frac{u+c}{2\rho C_p} \left[\frac{\partial p}{\partial x} + \rho c \frac{\partial u}{\partial x} \right]\end{aligned}$$

où c est la vitesse locale du son et pour $\vec{d} = [S] \vec{\mathcal{L}}$:

$$\begin{aligned}d_1^x &= \frac{\rho C_p}{c^2} [\mathcal{L}_1^x + \mathcal{L}_6^x] + \mathcal{L}_5^x \\ d_2^x &= \frac{C_p}{c} [\mathcal{L}_6^x - \mathcal{L}_1^x] \\ d_3^x &= \mathcal{L}_2^x \\ d_4^x &= \mathcal{L}_3^x \\ d_5^x &= \mathcal{L}_1^x + \mathcal{L}_4^x + \mathcal{L}_6^x \\ d_6^x &= -\frac{r}{r_1 - r_2} \left[\frac{\mathcal{L}_5^x}{\rho} + \frac{\mathcal{L}_4^x}{T} \right]\end{aligned}$$

Au final on résout à la frontière le système :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \vec{d} + \vec{C} = 0$$

Les expressions pour les autres directions s'obtiennent par symétrie.

6.1.3 Algorithmes

La méthode des lignes est employée pour la résolution du système (6.1) – (6.4). On discrétise d'abord les termes de dérivation spatiale, puis on intègre en temps le système d'équations différentielles ordinaires obtenu.

Espace

Les opérateurs de dérivation spatiale sont discrétisés par la méthode aux différences finies compactes de Lele [56]. Pour la dérivée première, on utilise un schéma centré à l'ordre 6, dégradé à l'ordre 4 aux noeuds frontière si besoin (direction non homogène). La dérivée seconde est également d'ordre 6 mais dégradée aux ordres 3 et 4 à la frontière. Les nombres d'onde modifiés de ces schémas sont tracés en figure (6.1). Le système pentadiagonal formé par le support numérique du schéma compact est résolu grâce à un algorithme de Thomas [83] pour le cas non homogène à un coût de l'ordre de $O(N)$ opérations. En configuration périodique le système devient cyclique. La formule de Woodbury [83] permet alors de se ramener à un système pentadiagonal bien conditionné sans augmentation notable du coût de calcul.

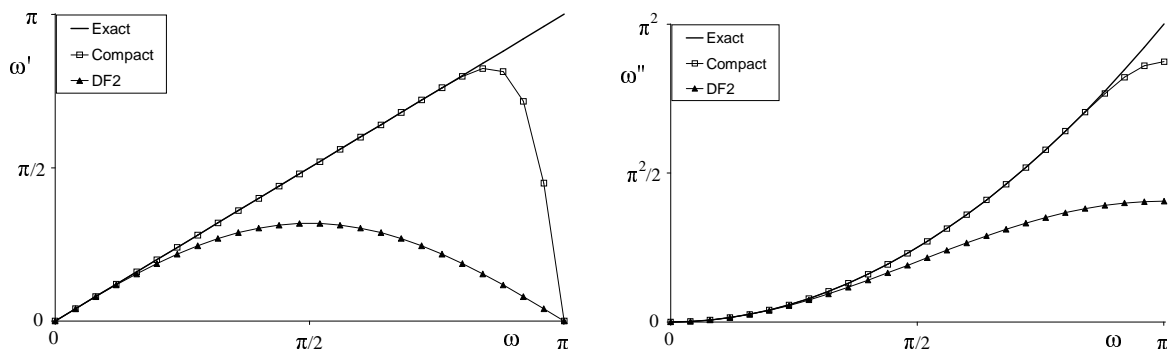


FIG. 6.1 – Nombres d’onde modifiés pour les schémas intérieurs de dérivation première (gauche) et seconde (droite) pour le code COMPACT.

Temps

L’avancement en temps est explicite et réalisé grâce à une méthode Runge-Kutta d’ordre 3 à stockage réduit (Jameson, Schmidt, Turkel [16]). Le pas de temps est évalué selon un critère de type CFL [46] :

$$\Delta t = \frac{1}{\frac{1}{\Delta t_1} + \frac{1}{\Delta t_2}} \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta t_1 = \frac{CFL}{\left| \frac{\lambda_x}{\Delta x} \right|_{max} + \left| \frac{\lambda_y}{\Delta y} \right|_{max} + \left| \frac{\lambda_z}{\Delta z} \right|_{max}} \\ \Delta t_2 = \frac{1}{2\mu \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right)} \end{array} \right.$$

où λ représente les valeurs propres du système :

$$\lambda_i = \{u_i - c ; u_i ; u_i + c\}$$

6.2 Implémentation

Dans cette section on évoque la structure retenue pour le code de calcul. Le codage est réalisé en Fortran 90 [21].

6.2.1 Arbre programmatique

La formation des flux numériques se résume au calcul de valeurs nodales de dérivées dont l’obtention nécessite la résolution d’un système matriciel pentadiagonal. L’équation de l’énergie du système Navier-Stokes (6.3) faisant intervenir simultanément les dérivées dans chaque direction d’espace (terme $u_{i,j} \sigma_{ij}$), on a décidé de calculer d’un bloc toutes les dérivées selon la direction z (tableaux de dimension $[0, Nx][0, Ny][0, Nz]$), puis d’évaluer celles selon x et y sur des sous-blocs de dimension $[0, Nx][0, Ny][0, M]$. Cette technique, représentée schématiquement en figure (6.2), requiert le stockage simultané d’une vingtaine de tableaux $3D$.

6.2.2 Optimisation

Un important effort d’optimisation a été consenti sur le code afin d’assurer la faisabilité des SND. Quelques éléments de ce travail numérique sont donnés.

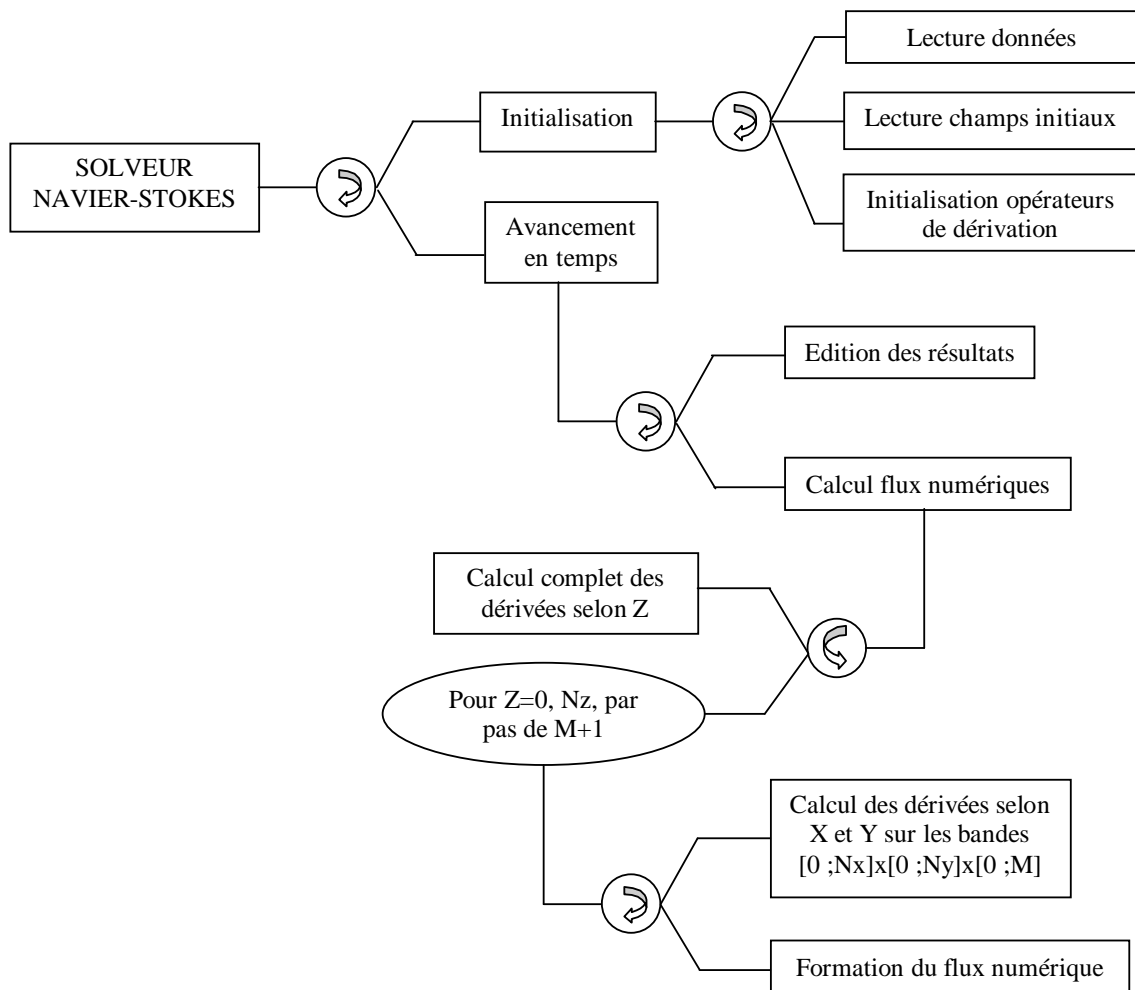


FIG. 6.2 – Arbre programmatique simplifié du code COMPACT.

Vectorisation

La continuelle montée en puissance des machines vectorielles et l'acquisition récente par l'IDRIS d'un supercalculateur NEC-SX5 nous ont conduit à orienter l'optimisation du code vers ce type d'architecture.

Pour être efficace, un processeur vectoriel doit être alimenté par des flux de données contiguës en mémoire et indépendants [37]. Le calcul des dérivées, qui représente la majeure partie du temps d'exécution, conduit à la résolution d'un système récurrent difficilement vectorisable. On profite donc des dimensions neutres du calcul pour effectuer une linéarisation et forcer ainsi la vectorisation. Selon z on aura une longueur de vecteur de l'ordre de $N_x \cdot N_y$, contre $N_x \cdot M$ selon y et $N_y \cdot M$ selon x . En choisissant correctement la valeur de M on peut optimiser le programme pour limiter le coût mémoire et maximiser les performances.

En pratique on obtient des performances supérieures à 5 Gflops sur un processeur de NEC-SX5 (pour une puissance crête de 8 Gflops) et un temps de calcul inférieur à $3 \cdot 10^{-7}$ seconde par itération Runge-Kutta et par point de maillage.

Parallélisation

La diminution du temps d'exécution du code passe également par la parallélisation de celui-ci. Plusieurs techniques sont envisageables dont :

- le partage des données (mode SIMD), qui consiste à faire effectuer les mêmes opérations par chaque processus et à synchroniser les calculs par échange de messages,
- le partage des tâches (mode MIMD), où chaque processus effectue une action pouvant être différente.

Bien que la première méthode ait été employée par Stoessel [103] et se soit avérée efficace, nous avons choisi d'utiliser la seconde, nettement plus facile à mettre en oeuvre grâce au standard OpenMP [36].

Le tableau (6.1) montre la qualité de parallélisation obtenue et la bonne "scalabilité" du code. Les performances crête et effective sont également tracées en figure (6.3).

Nbre Proc.	Gflops	efficacité //	% crête
1	5.1	1.00	64
2	10.1	1.00	63
3	14.9	0.99	62
6	29.4	0.95	61

TAB. 6.1 – Performances et efficacité parallèle du code COMPACT sur NEC-SX5.

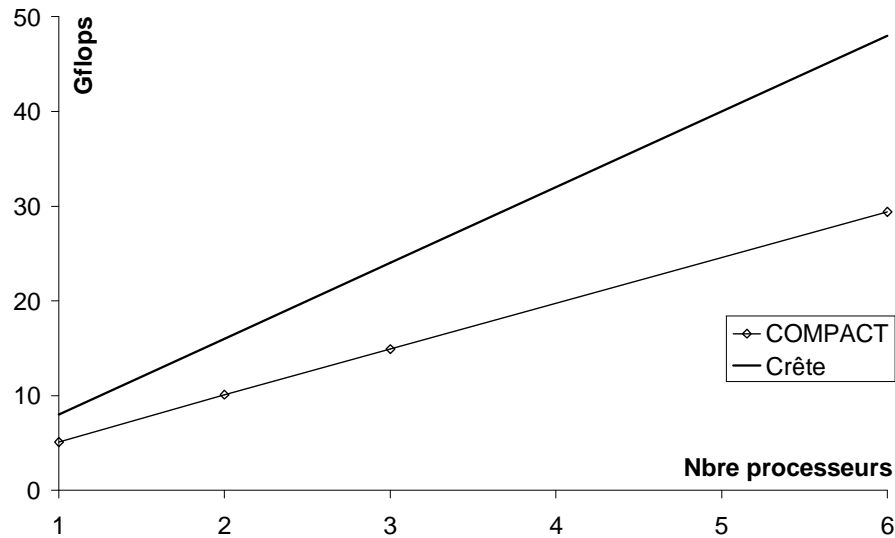


FIG. 6.3 – Performances du code COMPACT sur le NEC-SX5.

Chapitre 7

Le code WENO

Le second code développé dans le cadre de la thèse est basé sur l'utilisation de méthodes récentes à capture de choc : les schémas WENO (Weighted Essentially Non Oscillatory) [61]. La reconstruction WENO est une méthode d'ordre élevé développée spécifiquement pour les problèmes contenant des discontinuités et une physique riche (e.g. turbulence) [97]. L'idée de base consiste à choisir localement, pour un ordre donné, le stencil le plus régulier grâce à une procédure non linéaire. On peut ainsi garantir à la solution d'être d'ordre élevé en tout point du domaine, sans dégradation au voisinage de la discontinuité. Cette méthode est détaillée en annexe B.

7.1 Formulation mathématique

Ce second code, nommé WENO, est principalement destiné à tester l'approche de SGE implicite (équivalente au MILES) pour le mélange binaire sur maillage structuré. On a choisi une méthode d'ordre 5 qui semble être un bon compromis entre coût de calcul et précision [97][33].

7.1.1 Pouvoir de résolution

Le pouvoir de résolution de l'approximation conservative de la dérivée (annexe B.1.2) est déterminé grâce à une extension originale du concept de nombre d'onde modifié au cas des méthodes non linéaires.

Classiquement, l'évaluation du nombre d'onde modifié, introduit en section 5.1.2, revient à examiner la réponse de l'opérateur de dérivation à une fréquence fixée. Pour une méthode linéaire (e.g. différences finies) cette réponse intervient à la même fréquence que le signal initial alors que pour une méthode non linéaire (e.g. WENO) d'autres fréquences peuvent apparaître.

Ainsi, pour un mode k donné, on s'intéresse à la dérivation de la fonction F_k :

$$F_k(x) = \widehat{F}_k e^{jkx} \quad (7.1)$$

dont la dérivée numérique s'écrit :

$$\frac{\delta F_k}{\delta x} = F'_k(x) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \widehat{F}'_k(n) e^{jn x}$$

ou encore à partir de (7.1) en introduisant le nombre d'onde modifié k'_k :

$$F'_k(x) = j k'_k \widehat{F}_k e^{jkx}$$

En séparant la contribution au mode k des autres, on écrit :

$$jk'_k \widehat{F}_k e^{jkx} = \widehat{F}'_k(k) e^{jkx} + \sum_{n=-N/2; n \neq k}^{N/2} \widehat{F}'_k(n) e^{jnx} \quad (7.2)$$

Pour une méthode linéaire seul le premier terme de (7.2) est présent. Par analogie on pose :

$$\widehat{F}'_k(k) = jk'(k) \widehat{F}_k$$

Et donc,

$$k'_k = k'(k) - \sum_{n=-N/2; n \neq k}^{N/2} j \frac{\widehat{F}'_k(n)}{\widehat{F}_k} e^{j(n-k)x} \quad (7.3)$$

Le pseudo nombre d'onde linéaire $k'(k)$ est tracé en figure (7.1), en comparaison avec ceux des schémas décentrés d'ordre 3 et 5 suivant :

$$f'_i = \frac{1}{\Delta x} \left[-\frac{1}{6} f_{i+2} + f_{i+1} - \frac{1}{2} f_i - \frac{1}{3} f_{i-1} \right]$$

$$f'_i = \frac{1}{\Delta x} \left[-\frac{1}{20} f_{i+2} + \frac{1}{2} f_{i+1} + \frac{1}{3} f_i - f_{i-1} + \frac{1}{4} f_{i-2} - \frac{1}{30} f_{i-3} \right]$$

Bien que la méthode WENO soit d'ordre 5 en théorie, on constate que la partie dispersive est proche de celle du schéma décentré d'ordre 3 (i.e. centrée d'ordre 4), avec toutefois une forte atténuation des fréquences élevées. Cet effet de filtrage se retrouve également sur la courbe de dissipation numérique. Globalement, au vue de ces courbes, le schéma semble capturer correctement un tiers de la gamme de nombres d'onde et agit comme un filtre passe-bas sur le reste des fréquences.

Les coefficients de Fourier $-j \frac{\widehat{F}'_k(n)}{\widehat{F}_k}$ de la partie non linéaire du nombre modifié sont tracés en figure (7.2) pour les modes 1, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 31, du cas $Nx = 64$. D'une manière générale on constate pour le mode k considéré l'émergence des fréquences $(3 + 2i)k \bmod(Nx)$ dont l'amplitude décroît avec i (i entier). En pratique, lors de la résolution d'équation aux dérivées partielles de type convectif/diffusif, les fréquences supérieures à $k_c/3$ (physiques ou numériques) seront rapidement atténuées du fait de la forme du nombre d'onde linéaire.

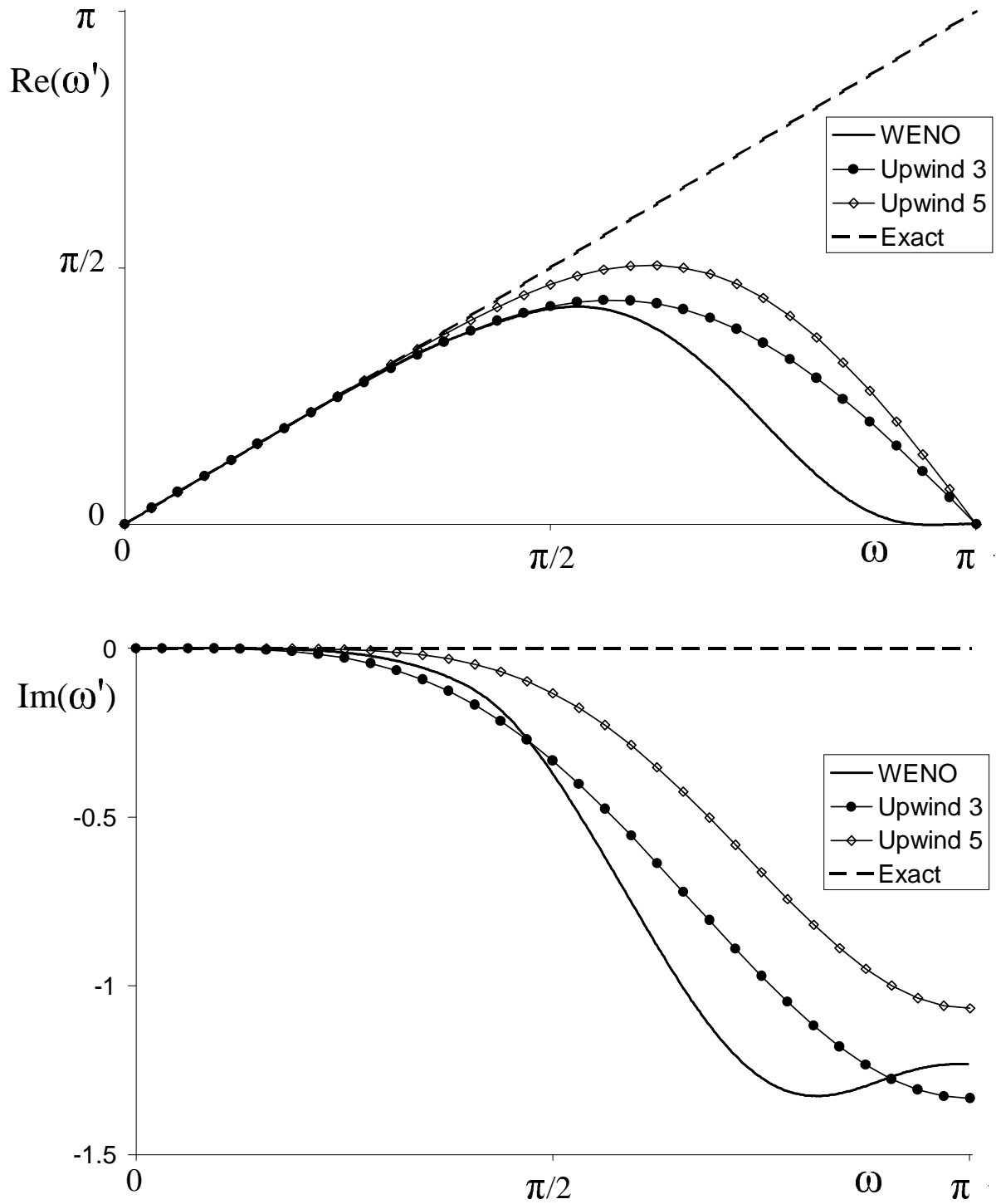


FIG. 7.1 – Pseudo nombre d'onde modifié du schéma WENO, parties dispersive (gauche) et dissipative (droite).

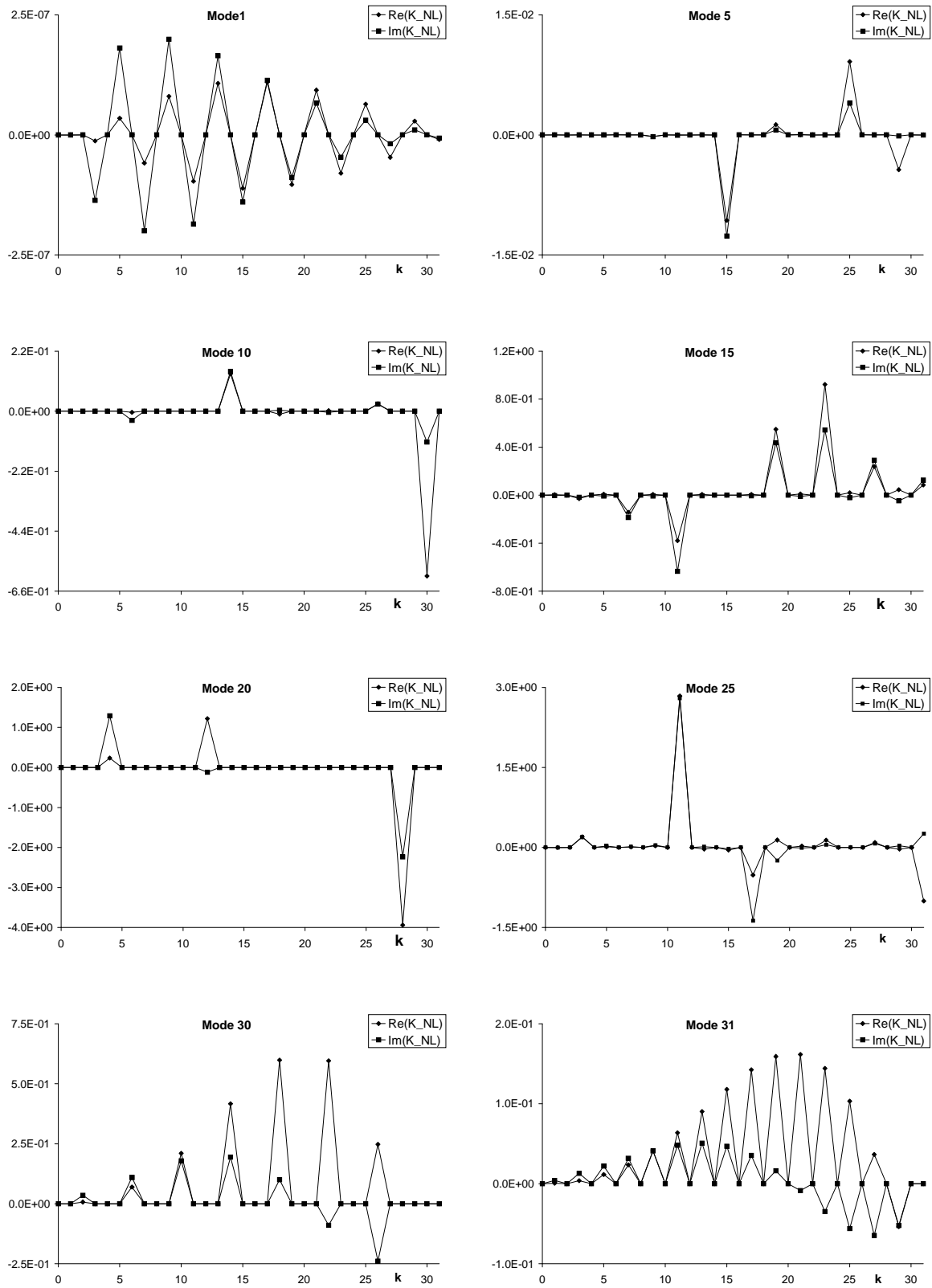


FIG. 7.2 – Part non linéaire du nombre d'onde modifié du schéma WENO

7.1.2 Équations

La méthode de résolution des systèmes hyperboliques par reconstruction WENO, détaillée en annexe B, est appliquée à la part Euler des équations de Navier-Stokes (1.2)–(1.5). Ces équations, résolues sous forme conservative faible, sont appelées ici en notation vectorielle :

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{H}}{\partial z} = \vec{V}$$

avec

$$\vec{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho e_t + p)u \\ \rho uY \end{bmatrix} \quad \vec{G} = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho e_t + p)v \\ \rho vY \end{bmatrix} \quad \vec{H} = \begin{bmatrix} \rho w \\ \rho wu \\ \rho wv \\ \rho w^2 + p \\ (\rho e_t + p)w \\ \rho wY \end{bmatrix}$$

L'adimensionnement du système, identique au code COMPACT, n'est pas détaillé.

Matrices de passage

La méthode de résolution nécessite le calcul des matrices de passage vers les bases caractéristiques associées aux flux \vec{F} , \vec{G} , \vec{H} . On ne présente que les expressions pour \vec{F} , les autres s'obtiennent par symétrie. La matrice de vecteurs propres à droite retenue est :

$$R = \frac{\rho C_p}{c^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{c^2}{\rho C_p} & 1 \\ u - c & 0 & 0 & 0 & u \frac{c^2}{\rho C_p} & u + c \\ v & (\gamma - 1)T & 0 & 0 & v \frac{c^2}{\rho C_p} & v \\ w & 0 & (\gamma - 1)T & 0 & w \frac{c^2}{\rho C_p} & w \\ H - uc & (\gamma - 1)Tv & (\gamma - 1)Tw & c^2 - (\gamma - 1)r \frac{h_1 - h_2}{r_1 - r_2} & \frac{c^2}{\rho C_p} \left[H - \frac{r(h_1 - h_2)}{r_1 - r_2} \right] & H + uc \\ Y & 0 & 0 & -(\gamma - 1) \frac{r}{r_1 - r_2} & -\frac{r_2}{r_1 - r_2} \frac{c^2}{\rho C_p} & Y \end{bmatrix}$$

où $H = h + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$. De même pour son inverse :

$$R^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\gamma r_2 T + uc + (\gamma - 1)H_2}{2\rho C_p} & \frac{-c - (\gamma - 1)u}{2\rho C_p} & \frac{-(\gamma - 1)v}{2\rho C_p} & \frac{-(\gamma - 1)w}{2\rho C_p} & \frac{\gamma - 1}{2\rho C_p} & \frac{\gamma(r_1 - r_2)T - (\gamma - 1)(h_1 - h_2)}{2\rho C_p} \\ -\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{w}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ \frac{H_2}{\rho C_p} & -\frac{u}{\rho C_p} & -\frac{v}{\rho C_p} & -\frac{w}{\rho C_p} & \frac{1}{\rho C_p} & -\frac{h_1 - h_2}{\rho C_p} \\ \frac{r - r_2}{r} - \frac{\gamma - 1}{c^2} H_2 & \frac{\gamma - 1}{c^2} u & \frac{\gamma - 1}{c^2} v & \frac{\gamma - 1}{c^2} w & -\frac{\gamma - 1}{c^2} & -\frac{r_1 - r_2}{r} + \frac{\gamma - 1}{c^2} (h_1 - h_2) \\ \frac{\gamma r_2 T - uc + (\gamma - 1)H_2}{2\rho C_p} & \frac{c - (\gamma - 1)u}{2\rho C_p} & \frac{-(\gamma - 1)v}{2\rho C_p} & \frac{-(\gamma - 1)w}{2\rho C_p} & \frac{\gamma - 1}{2\rho C_p} & \frac{\gamma(r_1 - r_2)T - (\gamma - 1)(h_1 - h_2)}{2\rho C_p} \end{bmatrix}$$

où $H_2 = \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) - h_2$.

Métriques

D'un point de vue géométrique on tient compte de la présence éventuelle de transformations du plan physique (x, z) vers le plan de calcul (X, Z) : $X = X(x, z)$ et $Z = Z(x, z)$. Les termes de dérivation première sont alors obtenus par les relations :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial z}\end{aligned}$$

En introduisant la discrétisation conservative des flux (cf annexe B), on est conduit à résoudre en tout point (i, j, k) du domaine (méthode des lignes) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \tilde{U}_{i,j,k} &+ \frac{1}{\Delta X} \left[\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j,k} \right] \left(\frac{\partial X}{\partial x} \right)_{i,j,k} + \frac{1}{\Delta Z} \left[\tilde{F}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{F}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)_{i,j,k} \\ &+ \frac{1}{\Delta y} \left[\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2},k} \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta X} \left[\tilde{H}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{H}_{i-\frac{1}{2},j,k} \right] \left(\frac{\partial X}{\partial z} \right)_{i,j,k} + \frac{1}{\Delta Z} \left[\tilde{H}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{H}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] \left(\frac{\partial Z}{\partial z} \right)_{i,j,k} \\ &= \tilde{V}_{i,j,k}\end{aligned}$$

Shu [97] rappelle que si on dispose d'une transformation suffisamment régulière, alors les propriétés WENO obtenues dans le domaine de calcul sont conservées sur le domaine physique. Nous ne considérons uniquement des transformations entre un plan physique (x, z) polygonal et un domaine de calcul (X, Z) rectangulaire. Cette double restriction (transformation plane et domaine polygonal) autorise l'emploi de la transformation de Schwarz-Christoffel pour déterminer les correspondances point à point entre les deux domaines. Pour cela on utilise la librairie *scpack* développée par Trefethen [107]. A titre d'exemple on a représenté en figure (7.3) les maillages physique et de calcul d'une rampe de compression.

7.1.3 Conditions aux limites

Pour plus de simplicité, Shu [97] recommande de conserver la formulation générale de la méthode WENO aux frontières et d'ajuster les valeurs des points fantômes (hors du domaine de calcul) suivant le type de frontière considérée. Trois sortes de conditions sont gérées par le code :

- La périodicité : les points fantômes sont reliés aux valeurs nodales internes. Par exemple :

$$\begin{array}{llll}(\rho)_{-1,j,k} = (\rho)_{N-1,j,k} & (\rho)_{-2,j,k} = (\rho)_{N-2,j,k} & \dots & \\(\rho u)_{-1,j,k} = (\rho u)_{N-1,j,k} & (\rho u)_{-2,j,k} = (\rho u)_{N-2,j,k} & \dots & \\(\rho v)_{-1,j,k} = (\rho v)_{N-1,j,k} & (\rho v)_{-2,j,k} = (\rho v)_{N-2,j,k} & \dots & \\(\rho w)_{-1,j,k} = (\rho w)_{N-1,j,k} & (\rho w)_{-2,j,k} = (\rho w)_{N-2,j,k} & \dots & \\(\rho e_t)_{-1,j,k} = (\rho e_t)_{N-1,j,k} & (\rho e_t)_{-2,j,k} = (\rho e_t)_{N-2,j,k} & \dots & \\(\rho Y)_{-1,j,k} = (\rho Y)_{N-1,j,k} & (\rho Y)_{-2,j,k} = (\rho Y)_{N-2,j,k} & \dots & \end{array}$$

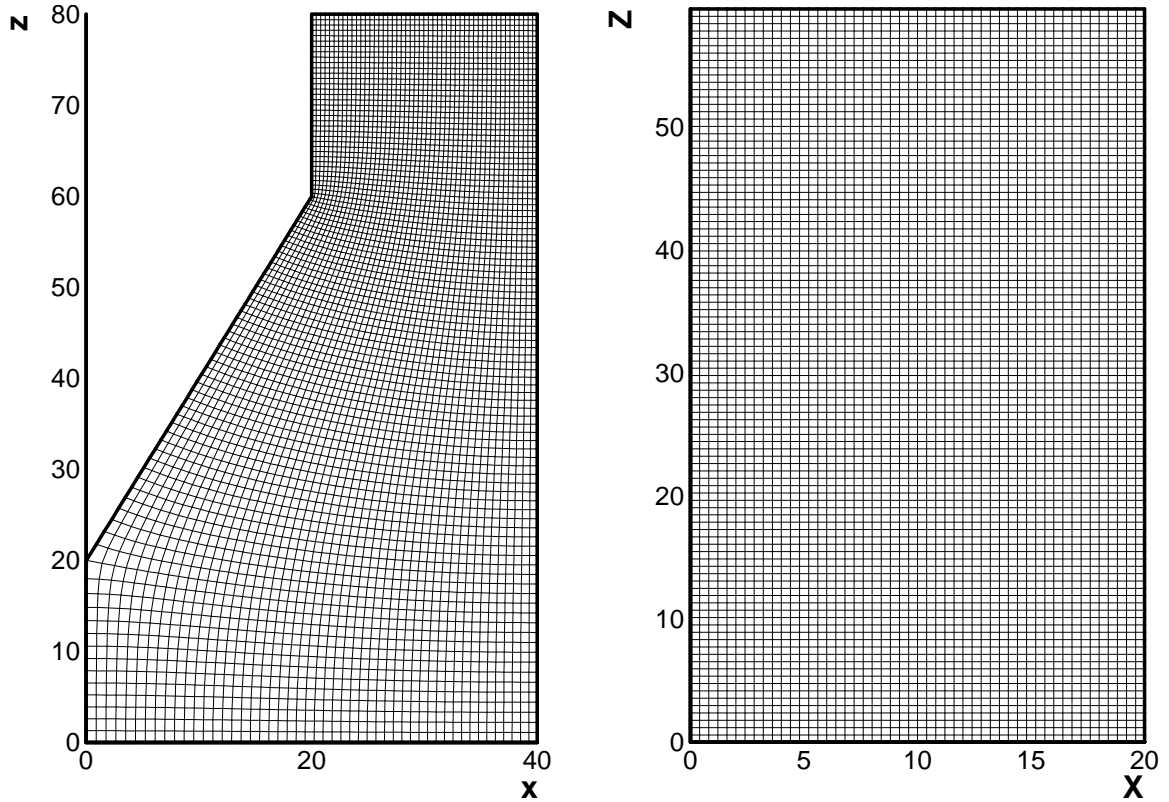


FIG. 7.3 – Exemple de projection plane des maillages physique (xz) à gauche, et de calcul (XZ) à droite du code WENO

- La symétrie : la vitesse perpendiculaire à la frontière est inversée. Pour une frontière de ce type en $i = 0$ on aura :

$$\begin{array}{lll}
 (\rho)_{-1,j,k} = (\rho)_{1,j,k} & (\rho)_{-2,j,k} = (\rho)_{2,j,k} & \dots \\
 (\rho u)_{-1,j,k} = -(\rho u)_{1,j,k} & (\rho u)_{-2,j,k} = -(\rho u)_{2,j,k} & \dots \\
 (\rho v)_{-1,j,k} = (\rho v)_{1,j,k} & (\rho v)_{-2,j,k} = (\rho v)_{2,j,k} & \dots \\
 (\rho w)_{-1,j,k} = (\rho w)_{1,j,k} & (\rho w)_{-2,j,k} = (\rho w)_{2,j,k} & \dots \\
 (\rho e_t)_{-1,j,k} = (\rho e_t)_{1,j,k} & (\rho e_t)_{-2,j,k} = (\rho e_t)_{2,j,k} & \dots \\
 (\rho Y)_{-1,j,k} = (\rho Y)_{1,j,k} & (\rho Y)_{-2,j,k} = (\rho Y)_{2,j,k} & \dots
 \end{array}$$

- Les entrées/sorties, par la méthode NSCBC détaillée en section 6.1.2. Dans ce cas les points fantômes se voient attribuer des valeurs irréalistes présentant de larges variations (e.g. $u_{-i} = (10i)^{10}$) afin de les exclure du processus de reconstruction.

7.1.4 Algorithmes

En complément des détails numériques de l'annexe B, on donne quelques indications sur le calcul des métriques et des flux visqueux, ainsi que sur l'avancement en temps.

Espace

Les termes de métrique sont obtenus à partir du domaine de calcul par une méthode de différences finies d'ordre 2 (centrée pour les points intérieurs et décentrée aux bords) en utilisant les relations [2] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial x} &= \frac{1}{J} \frac{\partial z}{\partial Z} & \frac{\partial Z}{\partial x} &= -\frac{1}{J} \frac{\partial z}{\partial X} \\ \frac{\partial Z}{\partial z} &= \frac{1}{J} \frac{\partial x}{\partial X} & \frac{\partial X}{\partial z} &= -\frac{1}{J} \frac{\partial x}{\partial Z} \end{aligned}$$

où

$$J = \frac{\partial x}{\partial X} \frac{\partial z}{\partial Z} - \frac{\partial x}{\partial Z} \frac{\partial z}{\partial X}$$

Les dérivées secondes du flux visqueux \vec{V} sont calculées en appliquant successivement deux opérateurs de dérivation première afin d'en limiter le coût numérique. Cet opérateur utilise des différences finies centrées d'ordre 4 pour les points intérieurs et est dégradé au second ordre aux frontières.

Temps

L'intégration en temps est réalisée selon la méthode des lignes. Shu [97] propose l'utilisation d'une méthode Runge-Kutta TVD (Total Variation Diminishing) pour la résolution des équations hyperboliques de la forme :

$$\frac{du}{dt} = F(u)$$

Il donne la méthode d'ordre 3 suivante, TVD pour un nombre de CFL maximum de 1 :

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t F(u^n) \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t F(u^{(1)}) \\ u^{n+1} &= \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t F(u^{(2)}) \end{aligned}$$

Le pas de temps est évalué par un critère identique à celui du code COMPACT.

7.2 Implémentation

Comme pour le code COMPACT, on évoque dans cette section la structure retenue pour le code de calcul. Le codage est réalisé en Fortran 90 [21] afin de bénéficier de la gestion dynamique de la mémoire.

7.2.1 Arbre programmatique

Les complexités numérique et d'implémentation de la méthode étant bien plus importantes que pour le code COMPACT on a décidé de limiter le nombre de sous-programmes nécessaires à la résolution du problème. Pour cela, on utilise les symétries des flux selon x , y , et z , au détriment de quelques transpositions. Le principe de la méthode est représenté schématiquement en figure (7.4).

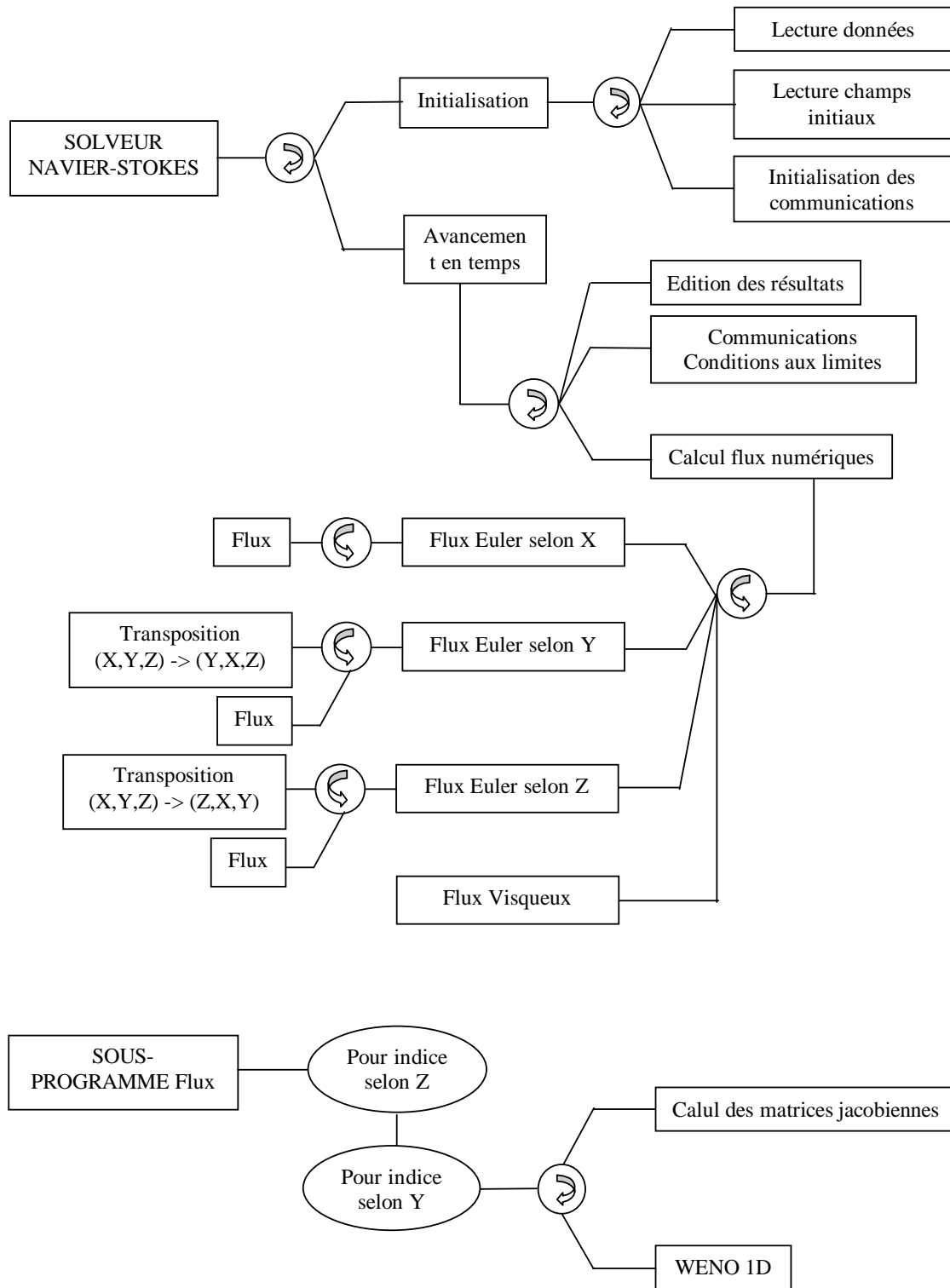


FIG. 7.4 – Arbre programmatique simplifié du code WENO.

7.2.2 Optimisation

A partir de la structure retenue pour le code, l'optimisation a été effectuée aussi bien d'un point de vue algorithmique qu'informatique. La présence des points fantômes et la localité des reconstructions ont conduit à l'utilisation de calculateurs parallèles scalaires et notamment de clusters de PC dont le principe est détaillé en annexe C.

Couplage différences finies/WENO

L'optimisation algorithmique a été menée en couplant la reconstruction WENO à la méthode de différences finies. En partant de la constatation que la méthode WENO est extrêmement consommatrice en temps de calcul (du fait des passages dans la base caractéristique), on a essayé de restreindre son application uniquement aux parties nécessaires de l'écoulement. Ce type de procédure a été utilisé dans la littérature sur des cas simples : interaction d'un choc fixe avec une turbulence homogène et isotrope [25], mais rarement à notre connaissance pour le cas de jets ou de couches de mélange qui sont nos cibles principales d'application.

La difficulté majeure consiste à déterminer le lieu d'application de l'une ou l'autre méthode. Différents tests numériques nous ont amené à considérer la dérivée de la densité comme indicateur. En pratique, on fixe un seuil limite acceptable (de l'ordre de $5 \cdot 10^{-3}$) au-delà duquel les flux sont calculés par l'approche WENO.

Les résultats du couplage WENO/différences finies centrées d'ordre 4 (DF4) sont présentés sur deux cas tests :

1. *Test 1* : la couche de mélange. On considère l'évolution temporelle de la couche de cisaillement isotherme (300 K) plane se développant entre l'azote et l'oxygène à nombre de Mach 0.3 pour un nombre de Reynolds de 100. Le domaine est rectangulaire, périodique selon x , et discrétisé par 64 points de grille dans chaque direction. A partir de conditions initiales identiques on obtient à $t = 50 \cdot t_{ref}$ les résultats présentés en figure (7.5). Le champ de fraction massique d'oxygène est identique dans les deux cas mais le couplage WENO/DF4 permet de réduire le temps de calcul d'un facteur 2.

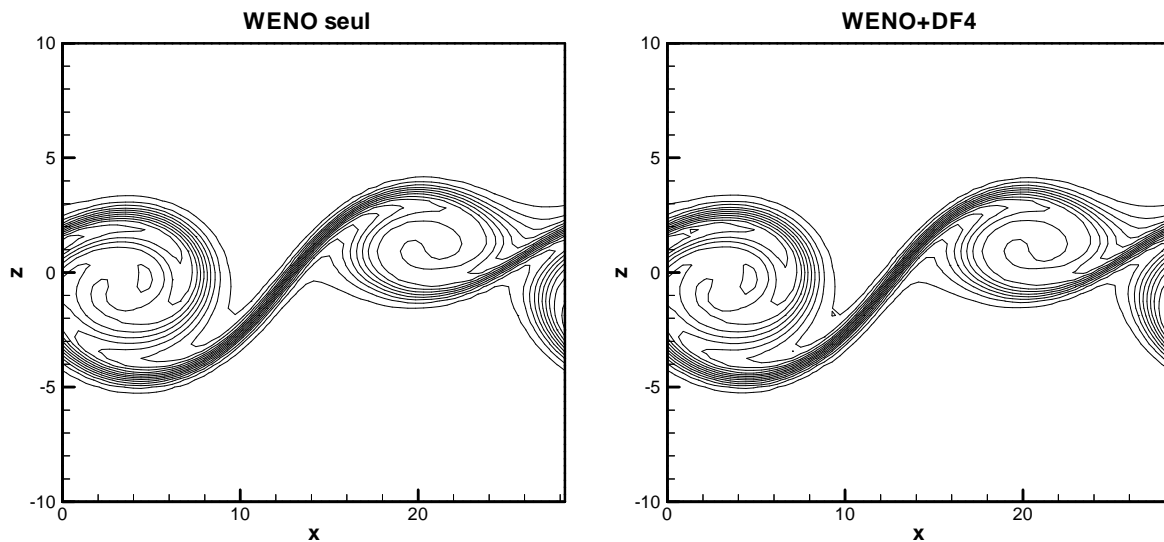


FIG. 7.5 – Iso-valeurs de la fraction massique d'oxygène de la couche de mélange temporelle N_2/O_2 à $t = 50 \cdot t_{ref}$ par la méthode WENO (gauche) et le couplage WENO/DF4 (droite).

2. *Test 2* : la rampe de compression. On considère maintenant l'évolution spatiale d'un jet isotherme (300 K) et iso-vitesse (1000 m/s) d'oxygène dans l'azote sur une rampe de compression à $Re = 1000$. Les frontières selon z sont de type symétrie et entrée/sortie pour x . Le domaine est discrétisé par 64 points de grille dans chaque direction. A partir de conditions initiales identiques on obtient à $t = 100 \cdot t_{ref}$ les résultats présentés en figure (7.6). L'accord entre les deux méthodes est là-encore excellent. La zone d'action du schéma DF4 est visualisée en figure (7.7) où on a représenté la valeur absolue des dérivées de la densité inférieure à $5 \cdot 10^{-3}$.

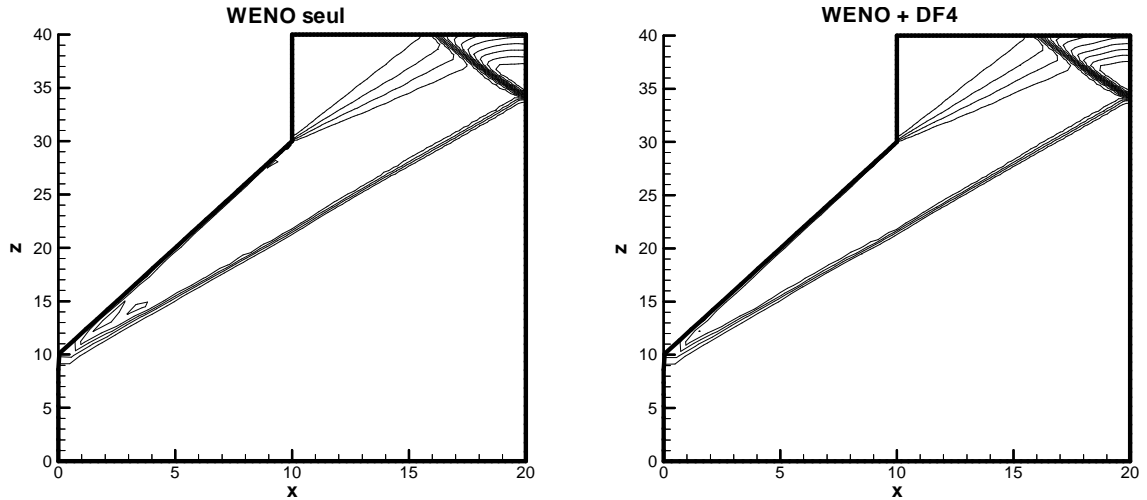


FIG. 7.6 – Iso-valeurs du champ de pression du jet iso-vitesse N_2/O_2 à $t = 100 \cdot t_{ref}$ pour la méthode WENO (gauche) et le couplage WENO/DF4 (droite).

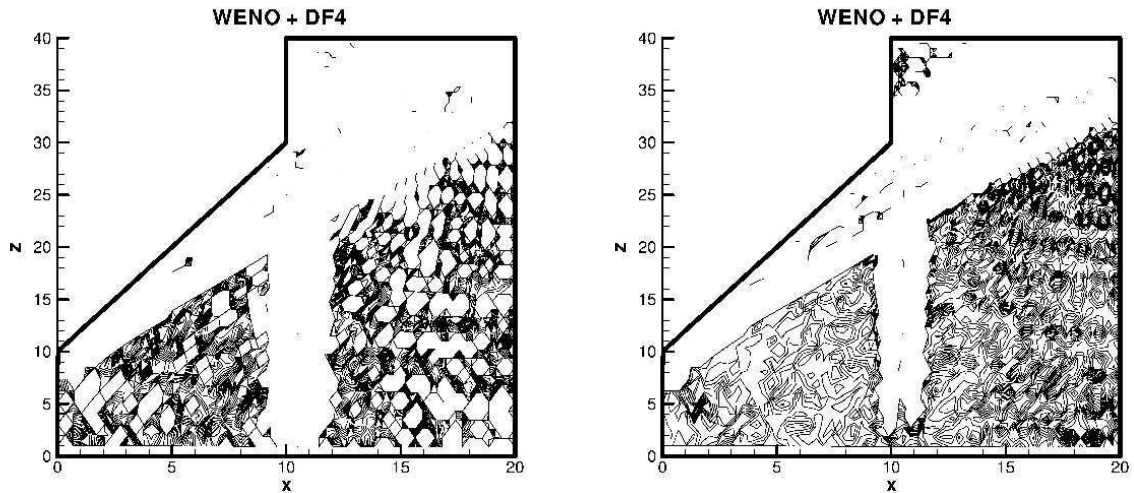


FIG. 7.7 – Lieu des dérivées du champ de densité selon x (gauche) et z (droite) dont la valeur absolue est inférieure à $5 \cdot 10^{-3}$

Bien que rudimentaire, ce critère nous a paru suffisamment simple et efficace pour ne pas chercher à l'optimiser plus avant.

Optimisation scalaire

L'optimisation informatique du code a débuté par l'optimisation scalaire. Un effort d'écriture important a été consenti afin de respecter les règles classiques :

- accès contigus en mémoire,
- réutilisation des lignes de cache,
- inlining des procédures au sein des boucles.

Parallélisation

Le temps de restitution de calcul est réduit grâce à la parallélisation du code. La technique de décomposition de domaine [17] a été choisie, d'une part pour la bonne "scalabilité" de la méthode et d'autre part pour la portabilité sur cluster de PC.

En supposant que le nombre de points de discrétisation selon z est proportionnel au nombre de processeurs utilisés, on effectue un découpage monodimensionnel du domaine selon cette direction. Le principe est représenté en figure (7.8). La topologie étant définie, chaque processus effectue les mêmes opérations sur un jeu de données différentes (mode SIMD). La synchronisation entre ces processus est assurée par échange de messages *via* la librairie MPI [38].

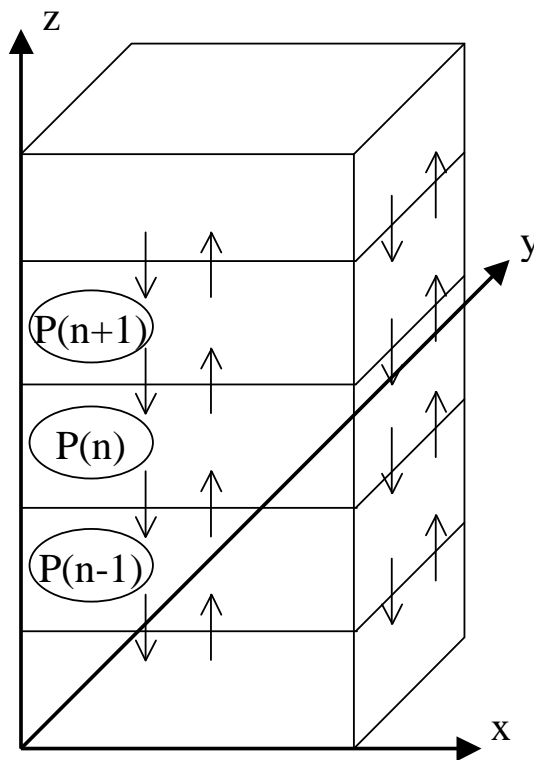


FIG. 7.8 – Principe de la décomposition de domaine 1D.

Les performances du code, obtenues sur le cluster EPEE décrit en annexe C, sont présentées en figure (7.9). Le cas test est un calcul 3D à la résolution de $64 \times 64 \times 128$ points de grille. On a tracé le rapport des temps de restitution séquentielle/parallèle, ainsi que l'efficacité parallèle en fonction du nombre de processeurs. Ce rapport, appelé speedup, croît moins vite que la loi linéaire mais reste correct. L'écart provient essentiellement du temps de latence du réseau.

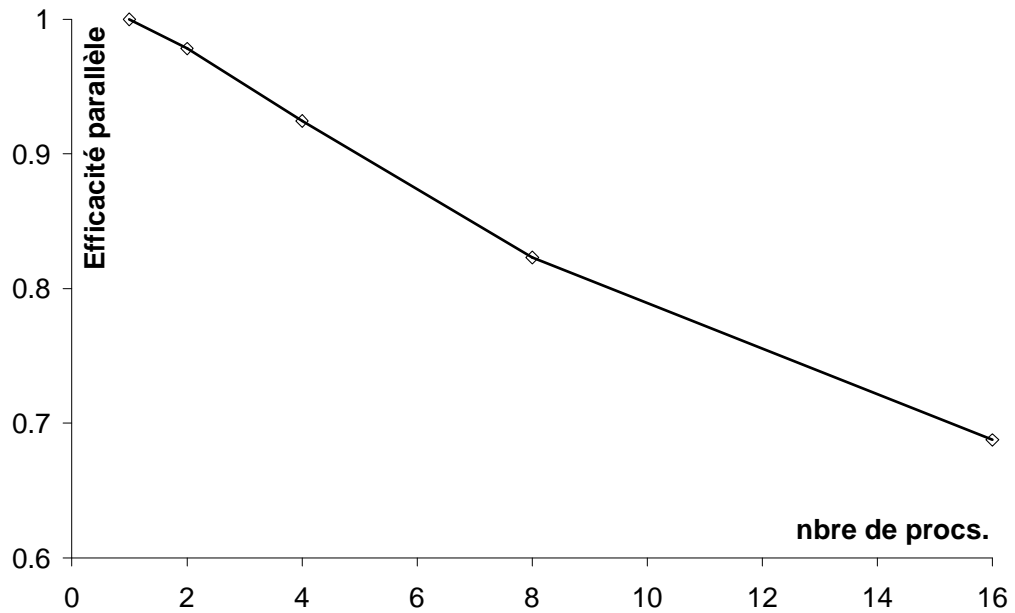
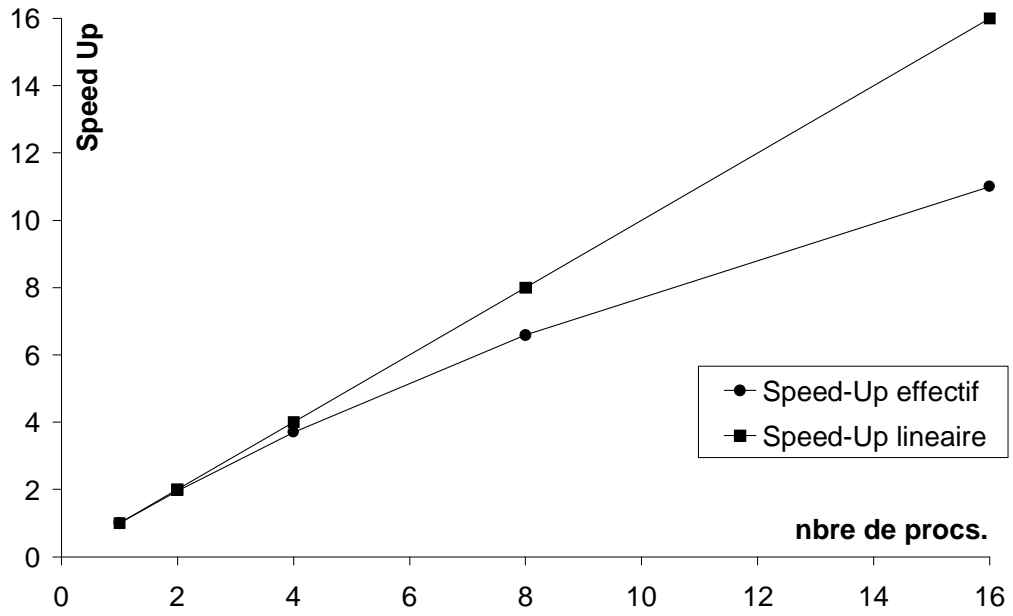


FIG. 7.9 – Speedup (haut) et efficacité parallèle (bas) du code WENO.

Chapitre 8

Comparaison et validation des codes

La validation des codes de calcul a été menée sur des cas tests simples allant du transport linéaire 1D à la simulation d'une couche de mélange. Ces tests permettent de mieux comprendre les caractéristiques propres de chacun des codes et d'en fixer les limites.

8.1 Tests linéaires 1D

Les tests linéaires sont utiles afin de qualifier le comportement dissipatif/dispersif des méthodes numériques. On a choisi d'étudier l'équation de convection munie de conditions aux limites adaptées :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (8.1)$$

$$u(x, 0) = x_0(x) \quad (8.2)$$

En configuration homogène le couple Runge-Kutta/COMPACT est aisément étudié par l'analyse linéaire de Von Neumann [2]. En supposant que le schéma d'intégration en temps est d'ordre 3,

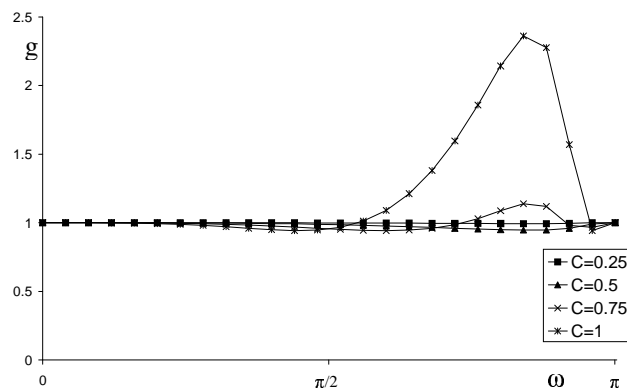


FIG. 8.1 – Module du facteur d'amplification du couple RK4/Compact pour l'équation de convection linéaire en fonction du nombre de CFL.

le facteur d'amplification de la méthode est :

$$g = \frac{\hat{u}_k^{n+1}}{\hat{u}_k^n} = 1 - \frac{C^2}{2} \omega'^2 + j \frac{C}{6} (C^2 \omega'^3 - 6\omega')$$

où C est le nombre de CFL, $C = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$, et ω' la pulsation modifiée. On constate en figure (8.1) que ce couplage est instable pour des nombres de CFL proches de 1, par conséquent on se limitera en pratique à une valeur de 0.5.

Pour une méthode vraiment non linéaire (non linéaire même pour une équation linéaire) comme la reconstruction WENO cette analyse est impossible. Il est seulement possible de comparer l'une à l'autre les deux méthodes sur des transports simples.

8.1.1 Convection d'un mode

On suppose pour tous les cas tests que la vitesse de convection de l'équation (8.1) est unitaire ($c = 1$). On considère d'abord le cas temporel (problème de condition initiale) puis le cas spatial (problème aux limites).

Temporel

En configuration temporelle le domaine est périodique et la condition initiale (8.2) s'écrit pour le mode k :

$$u(x, 0) = \sin\left(k \frac{2\pi}{L} x\right)$$

Avec $Nx = 64$ la grille numérique est apte à capturer 32 modes. Les tests sont effectués pour $k \in \{1, 5, 10, 15\}$, les résultats sont tracés en figure (8.2) à $t = 1$.

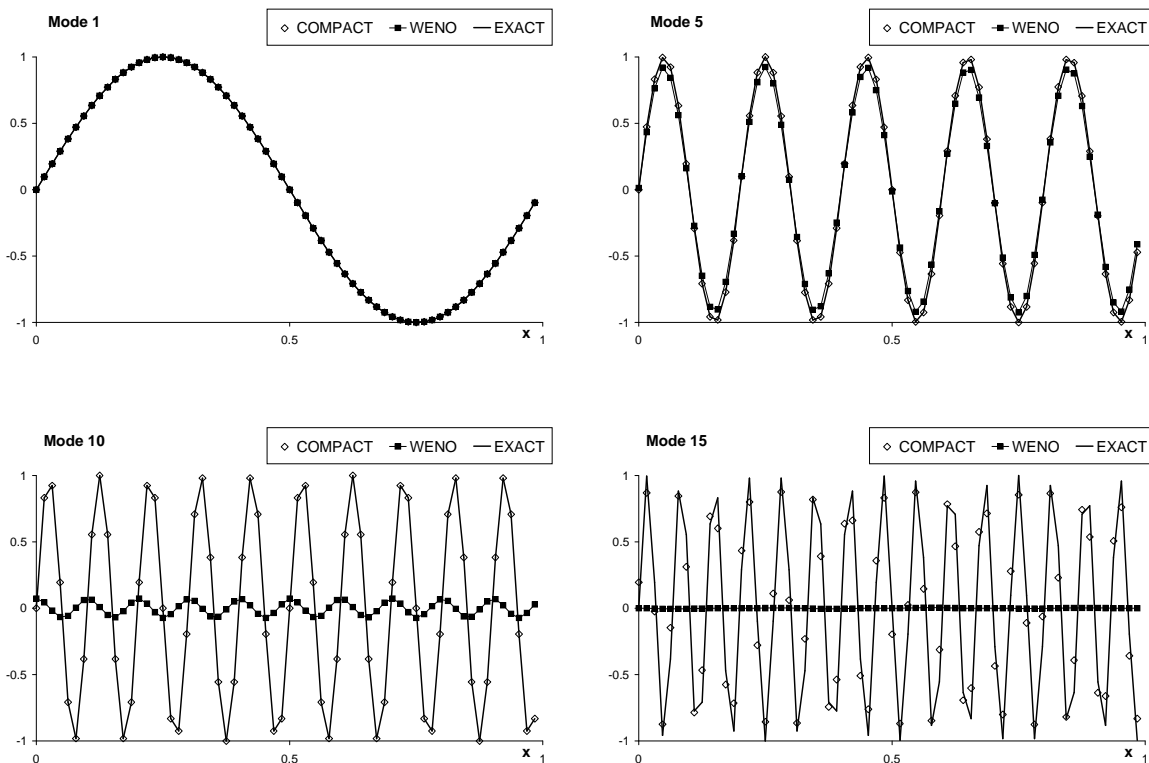


FIG. 8.2 – Transport d'un mode par l'équation de convection linéaire périodique avec $Nx = 64$, résultats à $t = 1$, $CFL = 0.5$

Compte tenu du haut pouvoir de résolution du schéma de dérivation, le code COMPACT donne de très bons résultats. Tous les modes sont correctement transportés avec une très légère atténuation pour le mode 15.

En revanche, le code WENO considère toute variation raide du champ comme une éventuelle discontinuité et dissipe fortement. Ainsi le mode 5 est déjà légèrement atténué alors que les modes supérieurs à 10 sont complètement écrasés à $t = 1$.

Spatial

En approche spatiale l'effet d'atténuation de la méthode WENO est encore plus net. Cette fois ci, plus on s'éloigne de l'entrée du domaine et plus les modes sont atténués. Toujours avec $Nx = 64$ et la même condition initiale, on impose comme conditions aux limites :

$$u(0, t) = \sin\left(k\left(\frac{2\pi}{L}x - ct\right)\right) \quad ; \quad u(L, t) = \text{sortie libre}$$

Les résultats de l'intégration de (8.1) par la méthode WENO sont présentés en figure (8.3). Sur le graphique du mode 10 on note clairement l'effet dispersif de la méthode, la part dissipative étant associée à l'atténuation de type exponentielle de l'amplitude du mode.

Cet exemple simple laisse supposer qu'en pratique l'utilisation du code WENO en configuration spatiale nécessitera un grand nombre de points de grille pour limiter le rôle de la diffusion numérique.

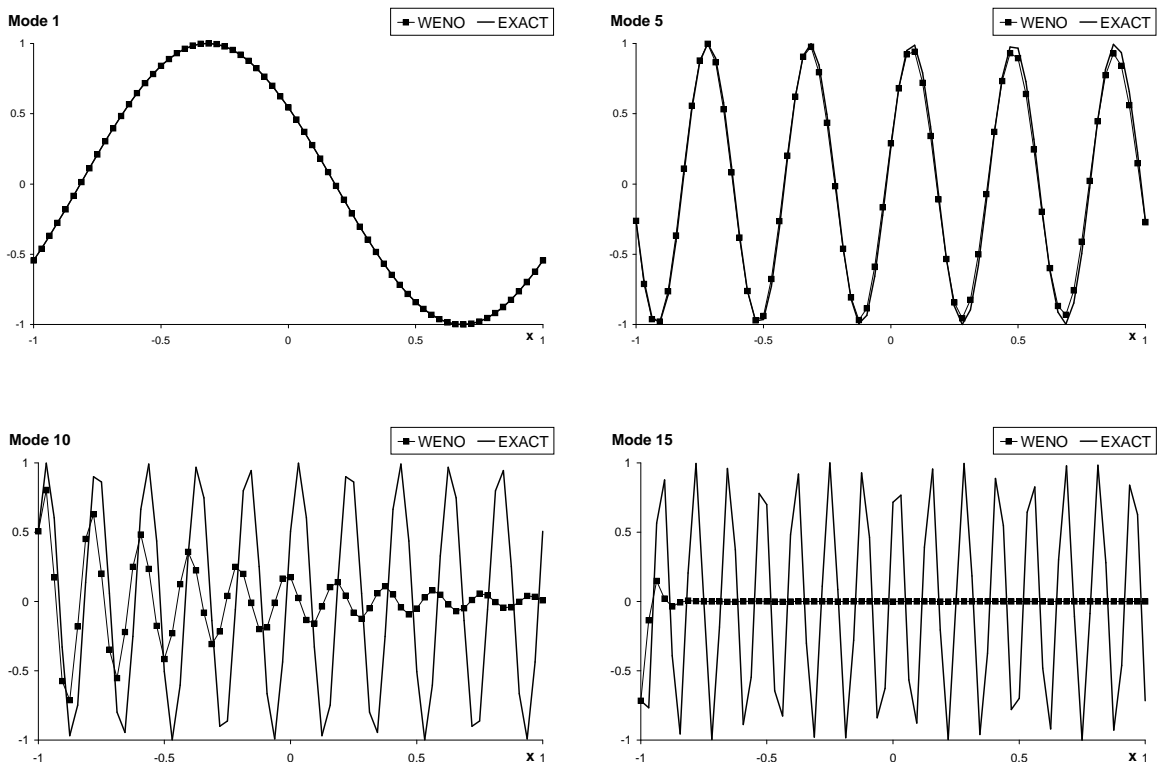


FIG. 8.3 – Transport d'un mode par l'équation de convection linéaire spatiale avec $Nx = 64$, résultats à $t = 10$, $\Delta t = 0.05$

8.1.2 Convection d'un gradient

On examine maintenant le cas d'un gradient. En configuration homogène, on transporte un profil en tangentes hyperboliques raccordées numériquement jusqu'à la dérivée seconde. La raideur du gradient est pilotée par le paramètre $2K$ qui mesure le nombre de points contenus dans celui-ci. Les résultats sont tracés en figure (8.4) pour les valeurs 0, 2, 4, 8 de K .

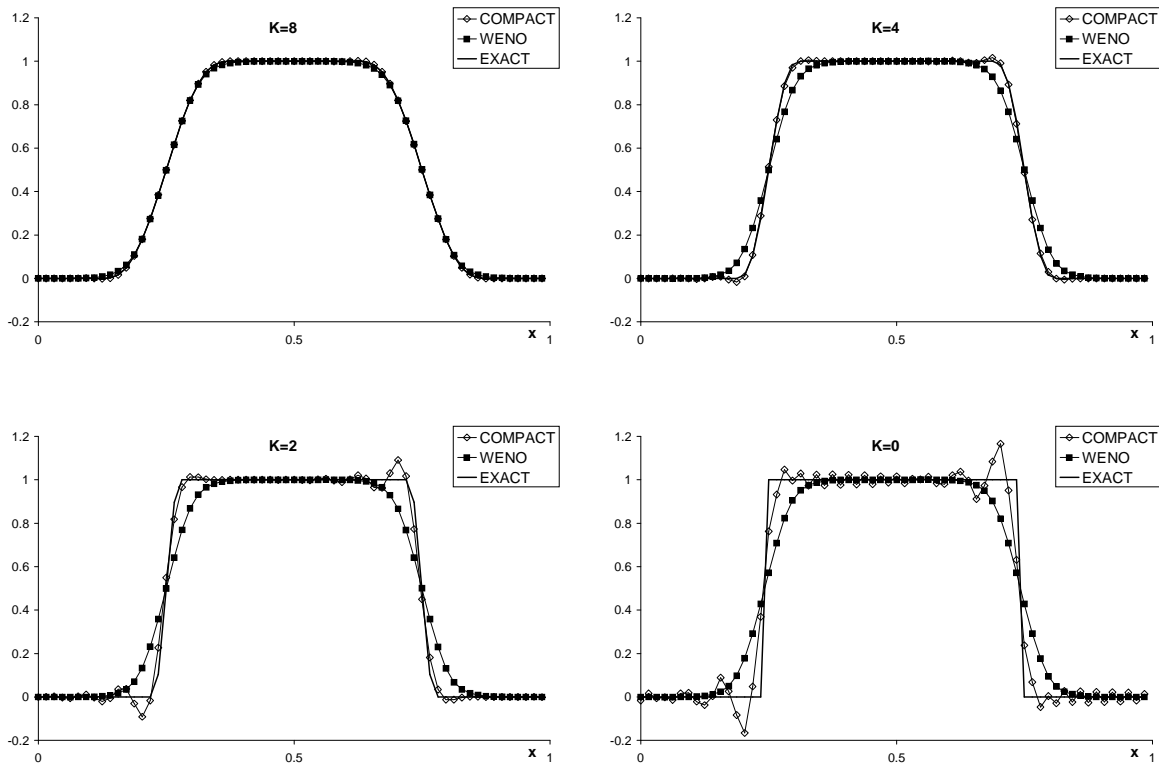


FIG. 8.4 – Transport d'un gradient par l'équation de convection linéaire périodique avec $Nx = 64$, résultats à $t = 10$, CFL=0.5

Lorsque $K = 8$ le gradient est bien résolu, les schémas WENO et COMPACT donnent des résultats très proches identiques et quasiment confondus avec la solution exacte.

A mesure que la raideur du gradient augmente on observe des signes évidents de sous-résolution de la méthode COMPACT (centrée) conduisant à une oscillation point à point du système pour le cas extrême $K = 0$. L'absence de dissipation de la méthode impose de disposer d'environ 12 à 16 points dans le gradient pour que le transport soit correct.

Pour le schéma WENO, quelle que soit la valeur de k , aucun signe d'oscillation n'est visible. Les modes mal résolus sont atténués pour arriver au transport d'une fonction suffisamment régulière. En pratique il faudra là encore 16 points dans le gradient pour un transport correct.

8.2 Tests non linéaires 1D

Deux types de problèmes non linéaires ont été considérés : la résolution de l'équation de Burgers et le problème du tube à choc. Dans cette section seule la méthode WENO est appliquée, ces tests nécessitant le transport de discontinuités trop raides pour le schéma COMPACT.

8.2.1 Burgers

L'équation de Burgers (5.12) est résolue en configuration homogène à partir de la condition initiale de Whitham sur une grille de 64 points.

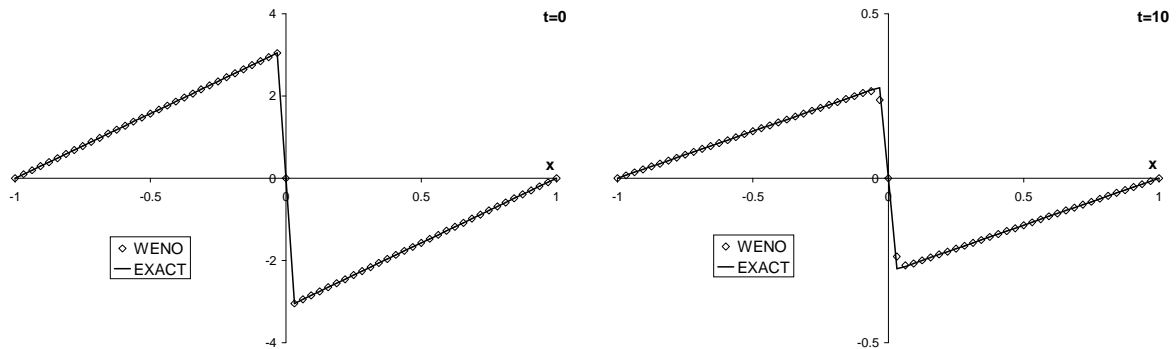


FIG. 8.5 – Transport du signal de Whitham par l'équation de Burgers avec $\nu = 0.005$, $N_x = 64$ et $\Delta t = 0.01$. Champ initial à gauche, et résultat à $t=10$ à droite.

La forme linéaire par morceaux de la solution (fig. 8.5) est aisément transportée par le schéma WENO d'ordre élevé (local en espace). La discontinuité initiale est légèrement atténuée mais la méthode se comporte mieux que dans le cas linéaire du fait de la redistribution énergétique propre à l'équation non linéaire de Burgers, et aux équations de Navier-Stokes d'une manière générale. Les spectres des solutions (à résolution identique) sont très proches et montrent l'effet dissipatif de la méthode (fig. 8.6).

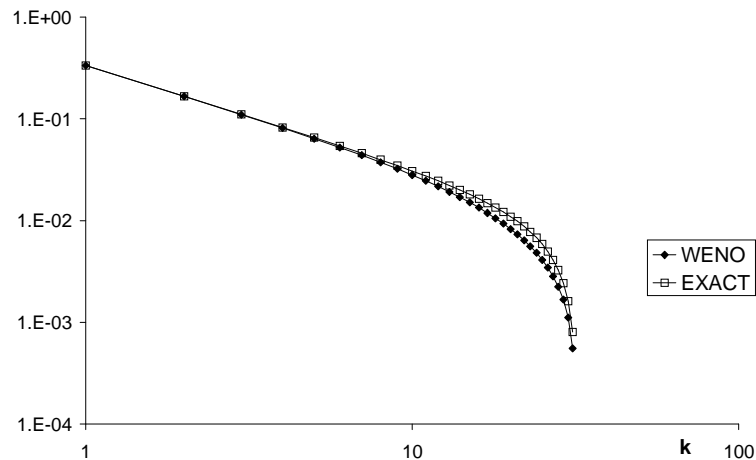


FIG. 8.6 – Spectre de la solution de l'équation de Burgers par méthode WENO.

8.2.2 Tube à choc

Le problème du tube à choc est un test standard pour les codes destinés à capturer les discontinuités d'un écoulement. On résout le système Euler 1D mono-espèce avec les conditions initiales du problème de Sod :

$$\begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ p \end{bmatrix}_G = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ p \end{bmatrix}_D = \begin{bmatrix} 0.125 \\ 0 \\ 0.1 \end{bmatrix}$$

où l'indice G désigne les conditions à gauche, et D celles à droite. Deux méthodes WENO ont été testées, l'une basée sur la reconstruction directe des flux (nommée DIRECT), et l'autre utilisant la reconstruction dans la base caractéristique (nommée CARACT).

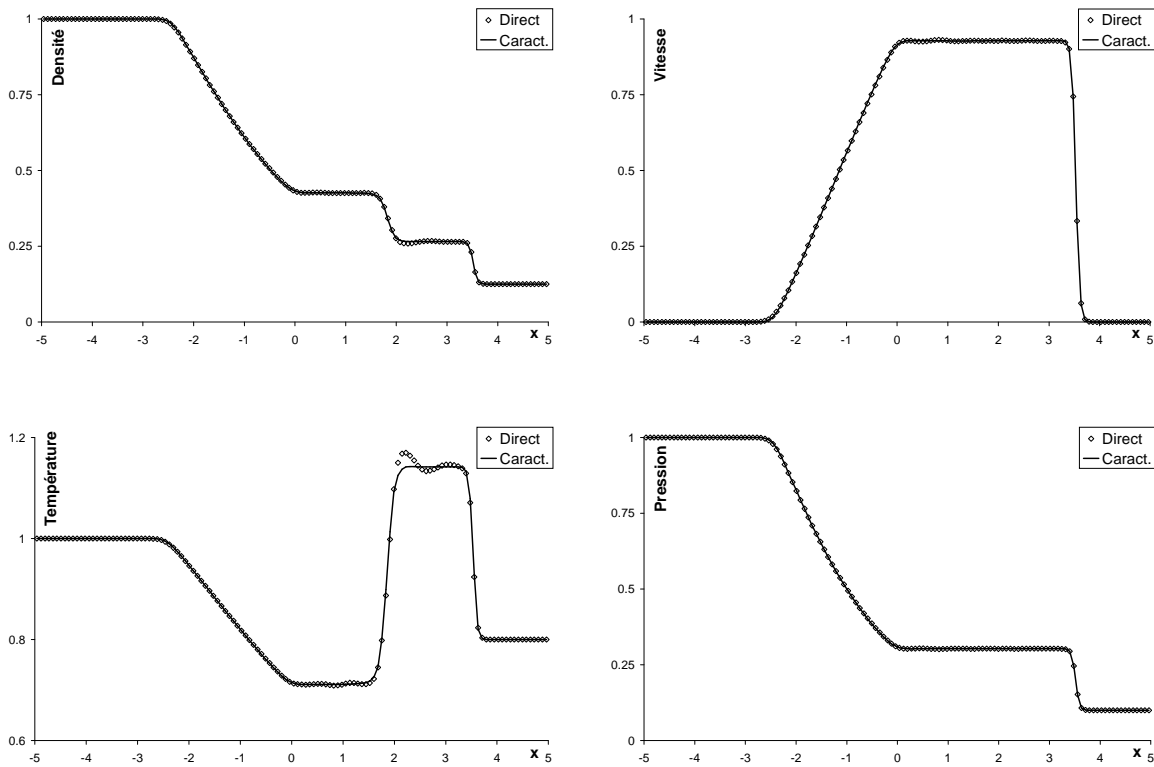


FIG. 8.7 – Problème du tube à choc à $t = 2$, $Nx = 128$, $\Delta t = 0.01$

Les champs de densité, de vitesse, pression et température sont tracés en figure (8.7). Malgré la simplicité du test (solution linéaire par morceaux) on constate une nette différence entre les deux approches.

La reconstruction directe, moins chère en temps de calcul que la formulation caractéristique, est moins précise. On note des oscillations sur la pression qui se traduisent par de fortes variations sur la température au niveau de la discontinuité de contact. En pratique on évitera donc la forme DIRECT, principalement lorsque de fortes variations de densité sont présentes dans l'écoulement (e.g. mélange H_2/O_2). On valide ainsi le choix de la forme caractéristique retenue en annexe B pour le code WENO.

8.3 Couche de mélange plane

On s'intéresse maintenant à un cas bidimensionnel présentant une physique riche : la couche de mélange temporelle compressible. Le cas mono-espèce permet de valider les codes avant de mener une étude paramétrique sur la résolution nécessaire au calcul du mélange binaire.

8.3.1 Mono-espèce

On considère l'écoulement mono-espèce se développant entre deux couches de fluide se déplaçant respectivement à U et $-U$ selon x . Les paramètres du calcul sont :

$$\begin{aligned} Lx &= 42 L_{ref} & Lz &= 50 L_{ref} \\ U &= 200 \text{ m/s} & T &= 300 \text{ K} \\ Re_{ref} &= 200 & Mc &= 0.6 \end{aligned}$$

où L_{ref} est l'épaisseur de vorticit  initiale. La valeur  lev e du nombre de Mach correspond   la borne inf rieure d'apparition d'eddy-shocklets [55] (fig. 8.8).

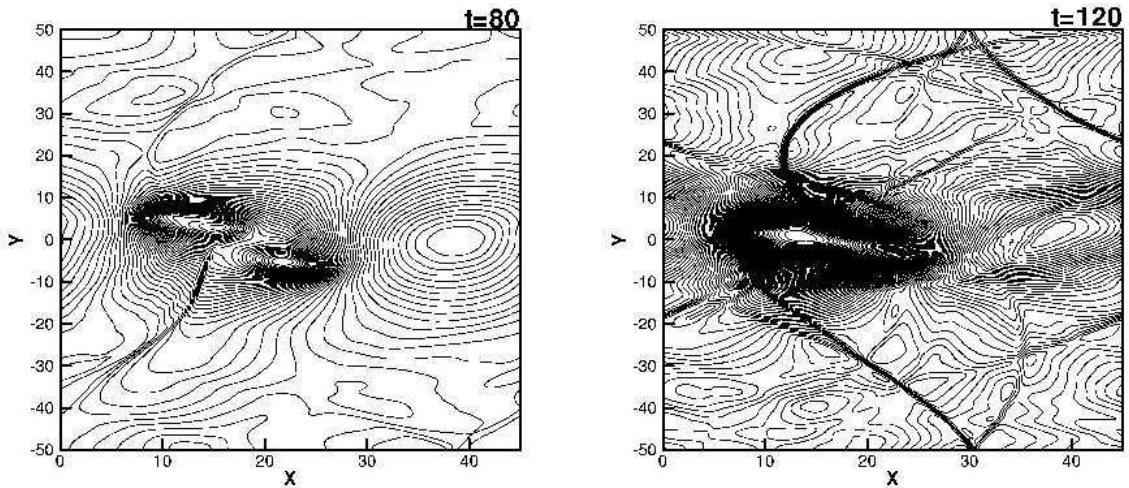


FIG. 8.8 – Evidence des Eddy shocklets dans la couche de m lange compressible   $Mc = 0.6$ sur le champ de pression   $t = 80$ (gauche) et $t = 120$ (droite) pour un nombre de Reynolds $Re = 1000$.

Les enroulements tourbillonnaires successifs acc l rent le fluide jusqu'  obtenir localement des zones supersoniques pouvant induire des ph nom nes de recompression forte. Ce cas est doublement instructif, il permet d'une part de tester la formulation des  quations r solv es pour le code COMPACT (premi re partie de la simulation jusqu'  $t = 80$) et d'autre part d'examiner le comportement des codes face   cette recompression.

Plusieurs m thodes ont  t  test es   diff rentes r solutions :

- Le code COMPACT sous forme divergente en variables conservatives, avec 256^2 et 512^2 points de maillage.
- Le code COMPACT sous forme convective en variables conservatives, avec 256^2 points de maillage.

- Un code utilisant une méthode de dérivation spectrale selon x et compact selon z , sous forme convective en variables conservatives, avec 256^2 points de maillage.
- Le code COMPACT sous forme convective en variables primitives, avec 256^2 et 512^2 points de maillage.
- Le code WENO avec $N_x = 192$, $N_z = 256$.

Les résultats sont présentés en figure (8.9) en terme de la grandeur statistique : épaisseur de quantité de mouvement compressible. Cette mesure de l'entraînement est calculée à partir de la définition suivante :

$$\theta(t) = \frac{1}{\rho_{ref} L_{ref} \Delta U} \int_{-L_z/2}^{L_z/2} \bar{\rho}(U - \bar{u})(U + \bar{u}) dz \quad (8.3)$$

où $\bar{\cdot}$ désigne la moyenne spatiale du champ selon la direction homogène et $\Delta U = 2U$ est la différence de vitesse des couches.

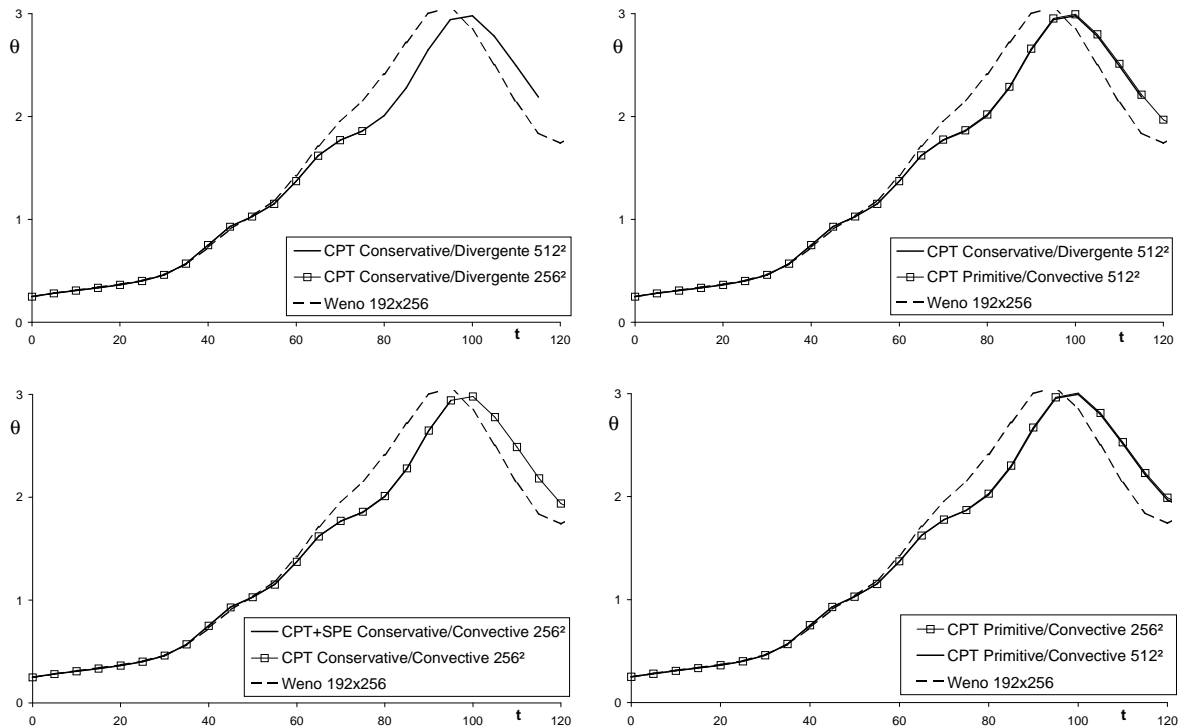


FIG. 8.9 – Comparaison des épaisseurs temporelles de quantité de mouvement compressible sur la couche de mélange temporelle plane mono-espèce.

Ce test, duquel est issue la figure (5.7), permet de tirer les constatations suivantes :

- La formulation conservative faible du solveur COMPACT est limitée par les erreurs d'aliasing. Même en l'absence de choc le calcul peut devenir instable par sous-résolution des zones d'appariements tourbillonnaires (fig. (8.10)).
- La forme convective en variables conservatives du même code est stable, et la forme compact absorbe mieux la recompression comparé à une méthode spectrale. La perte de pouvoir de résolution de la méthode agit comme un filtre.
- La dissipation numérique de la méthode WENO conduit à un entraînement excessif lorsque la solution devient riche en modes.

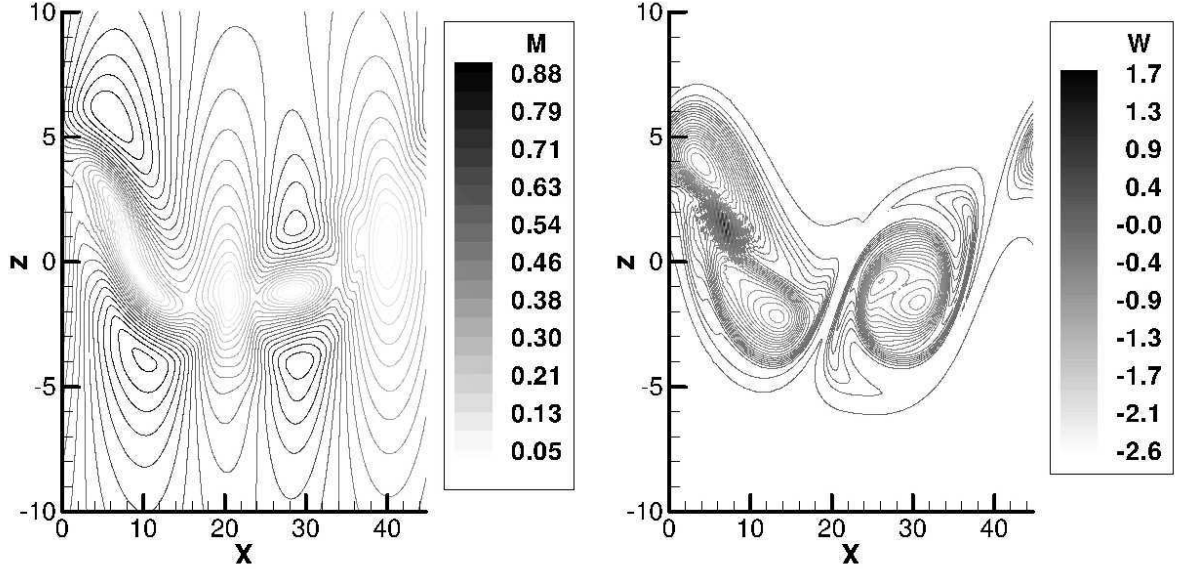


FIG. 8.10 – Champs de Mach (gauche) et rotationnel (droite) de la couche de mélange monoespèce sous forme conservative faible, à 256^2 points pour $t = 60$.

8.3.2 Bi-espèces

Les codes bi-espèces sont maintenant testés sur la couche de mélange temporelle pour les couples de fluides : N_2/O_2 et H_2/O_2 . Pour les conditions de calcul suivantes :

$$\begin{aligned}
 Lx &= 42 L_{ref} & Lz &= 40 L_{ref} \\
 U &= 100 \text{ m/s} & T &= 300 \text{ K} \\
 Re_{ref} &= 100 & CFL &= 0.5 \\
 M_{cN_2/O_2} &= 0.29 & M_{cH_2/O_2} &= 0.12
 \end{aligned}$$

le couple N_2/O_2 présente un rapport de densité proche de l'unité contre 16 pour le mélange H_2/O_2 . Les conditions initiales, obtenues à partir de profils en tangente hyperbolique, sont identiques pour chacun des cas test. L'oxygène ($Y \rightarrow 1$) est l'espèce correspondant à $z \rightarrow +\infty$. Les tests, réalisés sur un maillage uniforme, ont pour but de déterminer les limites de résolution inférieure et supérieure de chacun des codes, ainsi que de caractériser l'effet *numérique* de la forte variation de densité. On présente les résultats en terme de la grandeur instantanée : fraction massique d'oxygène, et des grandeurs statistiques :

- épaisseur de quantité de mouvement (eq. 8.3),
- épaisseur de vortacité :

$$\delta_w(t) = \frac{\Delta U}{\left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right|_{max}}$$

- spectre de vitesse longitudinale [59] :

$$E_u(k, t) = \frac{1}{Lz} \int_{-\frac{Lz}{2}}^{+\frac{Lz}{2}} |\hat{u}(k, z, t)|^2 dz$$

où \hat{u} est la transformée de Fourier monodimensionnelle de $u(x, z, t)$ selon la direction homogène x .

Couple N_2/O_2

Les calculs sont effectués pour différentes résolutions allant de 32^2 à 512^2 points de grille. On montre les résultats à $t = 30, 45, 60$ et 100 . Au-delà, la boîte de calcul est saturée. Ces instants ont été choisis car ils permettent de mettre en évidence l'émergence des instabilités de Kevin-Helmholtz ainsi que les différents appariements tourbillonnaires.

1. Fraction massique

Les champs instantanés de la fraction massique d'oxygène montrent clairement des signes d'instabilité pour le code COMPACT à faible résolution (fig. 8.11). Il est nécessaire de disposer d'au moins 128 points dans chaque direction (pour les paramètres de calcul retenus) afin de résoudre correctement les structures de l'écoulement. Au-delà on ne distingue plus visuellement de différence entre les simulations (fig. 8.12).

Le code WENO, quant à lui, est stable quelle que soit la résolution utilisée du fait de la dissipation numérique adaptative de la méthode. Dès 32^2 (fig. 8.11) on observe l'émergence des instabilités de Kevin-Helmholtz et une localisation spatiale correcte des structures de l'écoulement (liée aux erreurs dispersives). Néanmoins, une résolution minimale de 128^2 semble nécessaire afin de limiter l'effet diffusif de la méthode (fig. 8.12).

2. Spectres de vitesse longitudinale

Les résultats précédents sont confirmés par l'étude des spectres de vitesse longitudinale (fig. 8.13). Le code WENO est toujours dissipatif et le calcul à 128^2 donne d'excellents résultats, en accord avec ceux obtenus à résolution supérieure.

Le code COMPACT est beaucoup moins stable. On note un empilement de l'énergie à la coupure lorsque l'écoulement devient complexe. Si la résolution n'est pas suffisante, cette énergie remonte vers les bas nombres d'onde (back-scatter) et conduit à des instabilités numériques. Là encore, 128^2 points de grille semblent être un minimum.

La comparaison des deux méthodes, sur la base des spectres de vitesse (fig. 8.14), montre un excellent accord des codes sur une large gamme de nombres d'ondes. On notera cependant que lorsque l'écoulement est bien résolu, à nombre de points de grille équivalent le code COMPACT est beaucoup plus précis et économique que le WENO.

3. Épaisseurs statistiques

Pour 128^2 , les résultats statistiques du code WENO, à la fois sur l'épaisseur de vorticit  et sur l'épaisseur de quantité de mouvement, sont cohérents avec les calculs à résolution supérieure (fig. 8.15) pour la phase de croissance linéaire et les premiers appariements tourbillonnaires.

A l'inverse, le code COMPACT à 64^2 (limite stable) prédit correctement l'épaisseur de vorticit  mais pas l'épaisseur de quantité de mouvement qui ne devient correcte que lorsque la boîte de calcul est saturée.

A haute résolution, la comparaison des deux méthodes est excellente tant que la boîte de calcul n'est pas saturée. Au-delà, l'unique grosse structure tourbillonnaire induit de forts gradients de vitesse g r s diff remment par les conditions aux limites des deux codes : NSCBC pour le COMPACT et sym trie pour le WENO.

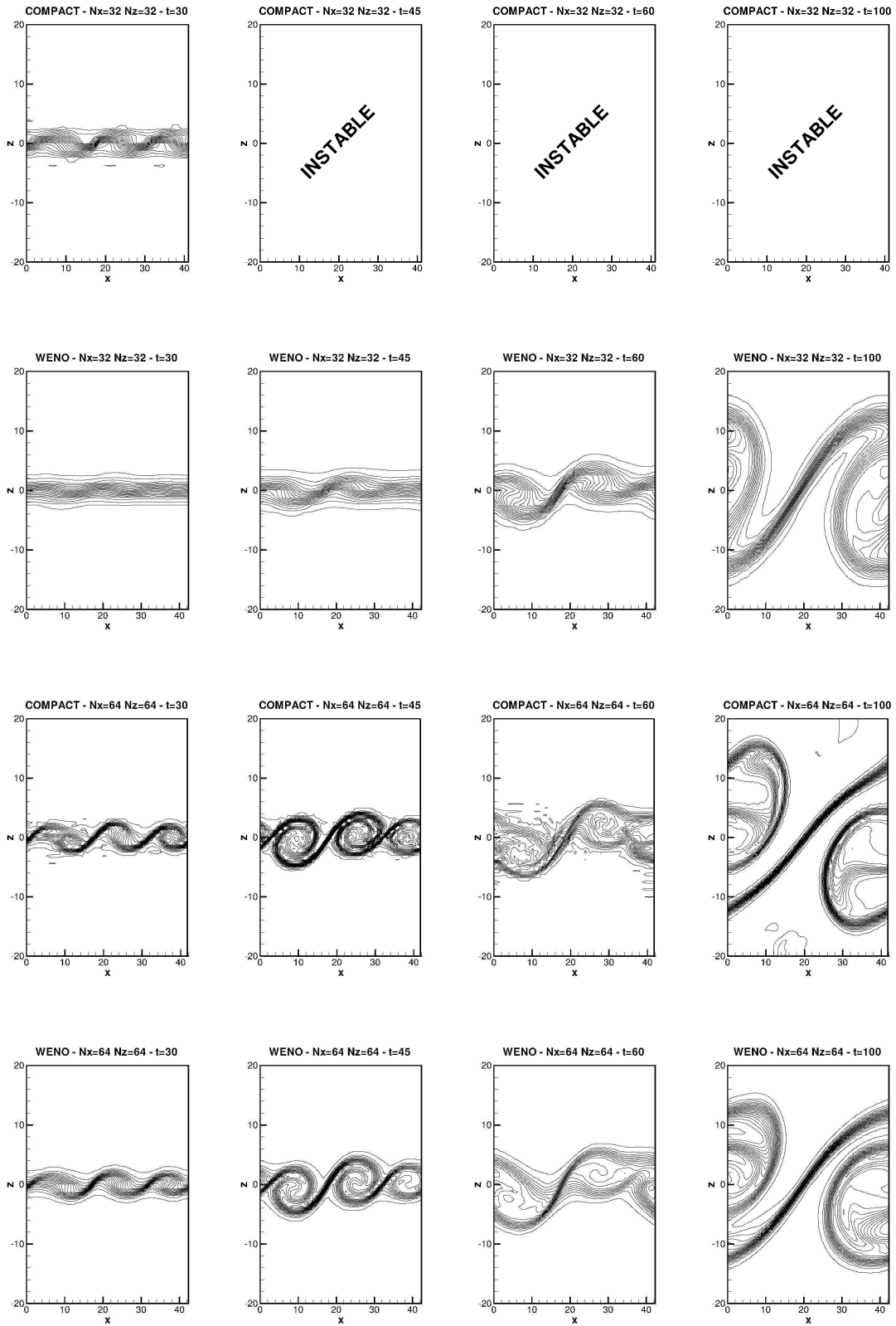


FIG. 8.11 – Couche de mélange N_2/O_2 à résolution 32^2 (haut) et 64^2 (bas). Iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène à $t = 30, 45, 60, 100$ pour les codes COMPACT et WENO.

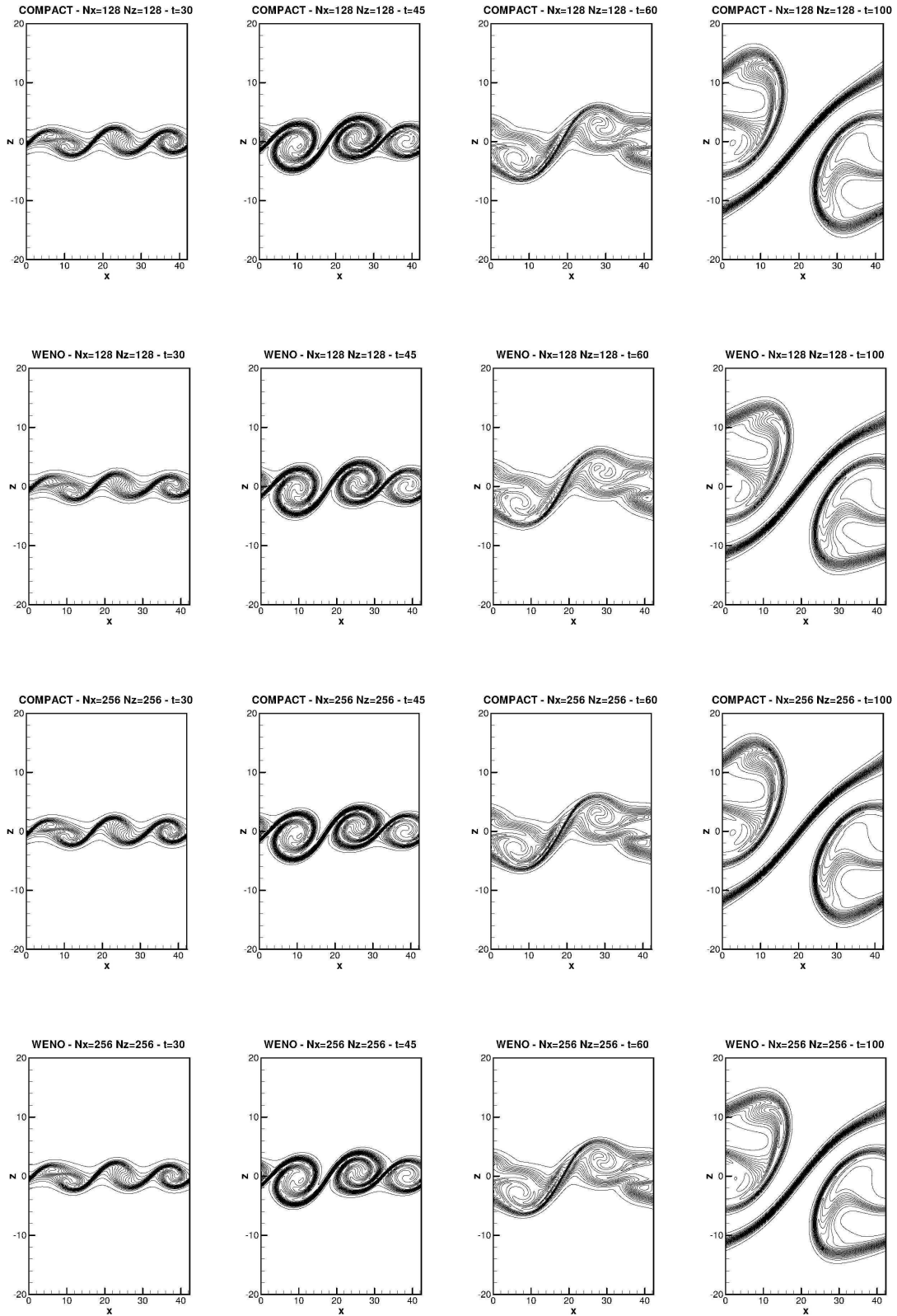


FIG. 8.12 – Couche de mélange N_2/O_2 à résolution 128^2 (haut) et 256^2 (bas). Iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène à $t = 30, 45, 60, 100$ pour les codes COMPACT et WENO.

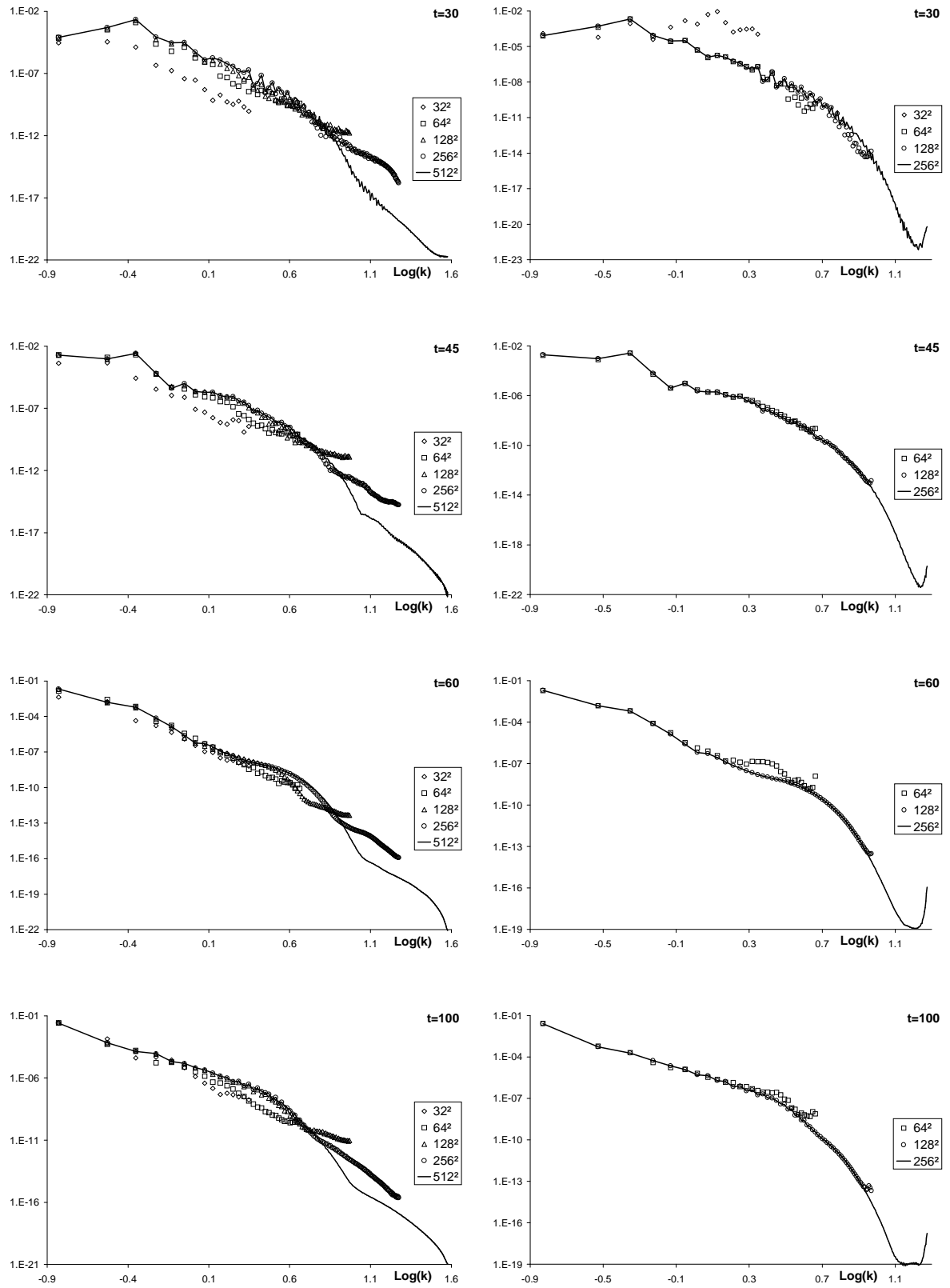


FIG. 8.13 – Spectres monodimensionnels de la vitesse longitudinale pour la couche de mélange N_2/O_2 calculée par le code WENO (gauche) et COMPACT (droite).

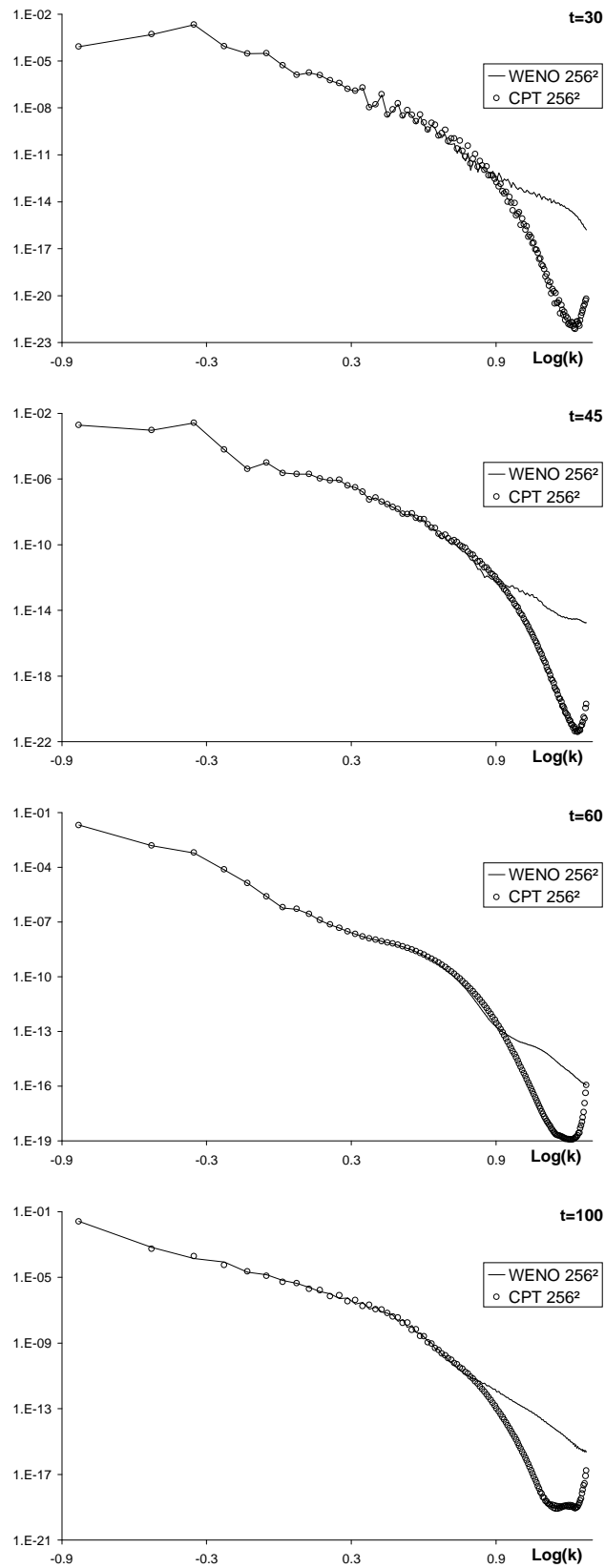


FIG. 8.14 – Comparaison des spectres monodimensionnels de la vitesse longitudinale pour la couche de mélange N_2/O_2 calculée par les codes WENO et COMPACT.

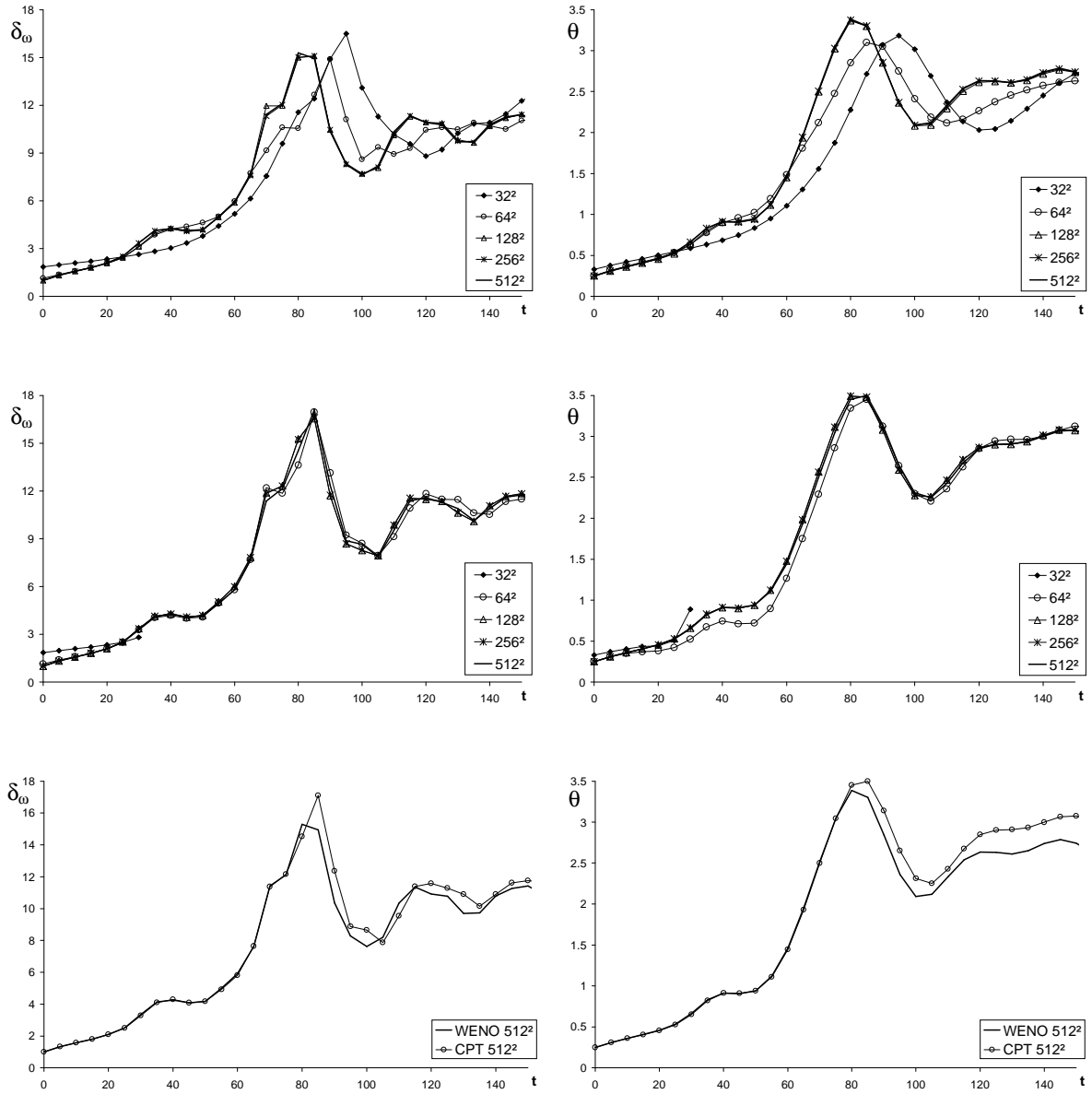


FIG. 8.15 – Épaisseurs de vorticité (gauche) et de quantité de mouvement (droite) pour la couche de mélange N_2/O_2 calculée par les codes WENO (haut) et COMPACT (milieu). Comparaison des deux à 512^2 en bas.

Couple H_2/O_2

Comparé au cas précédent, la vitesse du son dans l'hydrogène impose une réduction d'un facteur 4 du pas de temps.

1. *Fraction massique*

Le code COMPACT est instable à faible résolution et le code WENO donne des résultats assez différents entre 64^2 et 128^2 , signe de la forte diffusion numérique activée par les gradients locaux de densité (fig. 8.16). Il faut cette fois une résolution minimale d'environ 256^2 pour le WENO, et 512^2 pour le COMPACT, pour que les deux méthodes donnent des résultats similaires sur le champ de fraction massique d'oxygène.

2. *Spectres de vitesse longitudinale*

On retrouve un comportement similaire à celui du cas N_2/O_2 . L'effet dissipatif de la reconstruction WENO est important et l'empilement énergétique lors de la résolution COMPACT est fortement marqué (fig. 8.18). Le contenu spectral de la solution est maintenant nettement plus riche que dans le cas précédent et l'accord entre les spectres WENO et COMPACT s'effectue sur une moins grande plage de nombre d'onde (fig. 8.19).

3. *Épaisseurs statistiques*

Les effets de sous-résolution sont notables sur les grandeurs statistiques (fig. 8.20) puisque 256^2 points sont nécessaires pour le WENO pour caractériser correctement l'épaisseur de vortacité, contre 512^2 pour le COMPACT.

La comparaison de ces épaisseurs entre les deux codes est bonne tant que la structure de l'écoulement ne devient pas trop complexe.

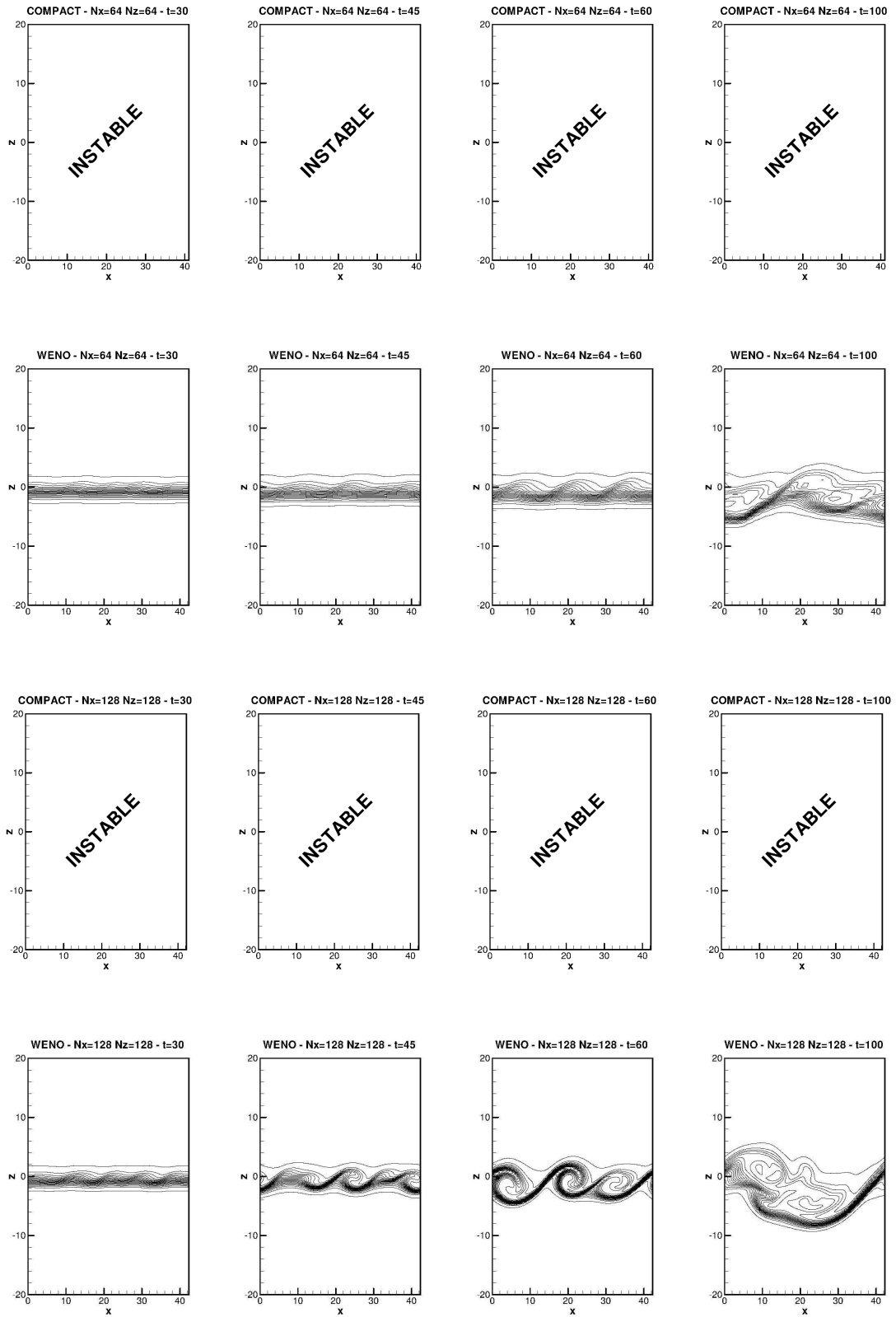


FIG. 8.16 – Couche de mélange H_2/O_2 à résolution 64^2 (haut) et 128^2 (bas). Iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène à $t = 30, 45, 60, 100$ pour les codes COMPACT et WENO.

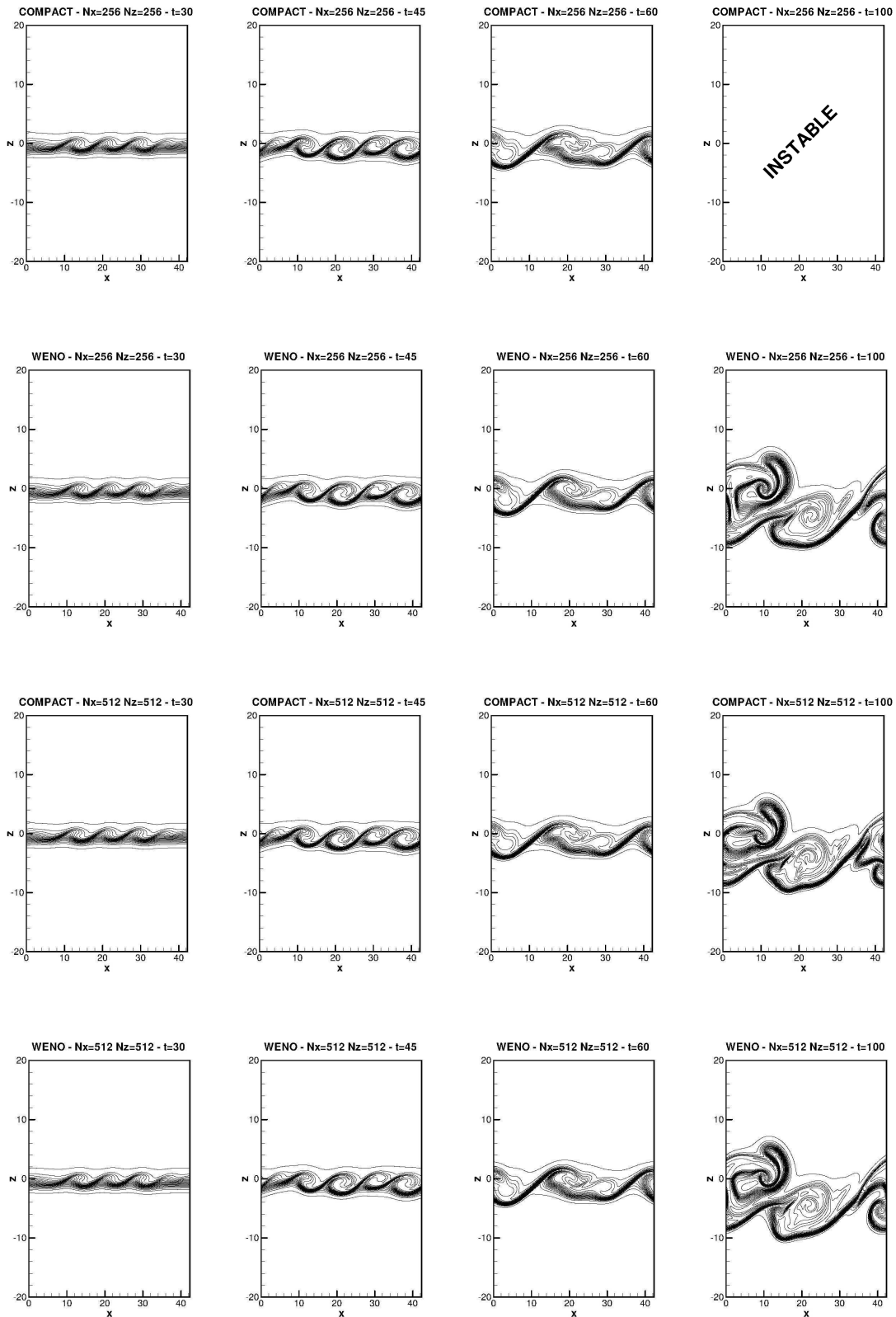


FIG. 8.17 – Couche de mélange H_2/O_2 à résolution 256^2 (haut) et 512^2 (bas). Iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène à $t = 30, 45, 60, 100$ pour les codes COMPACT et WENO.

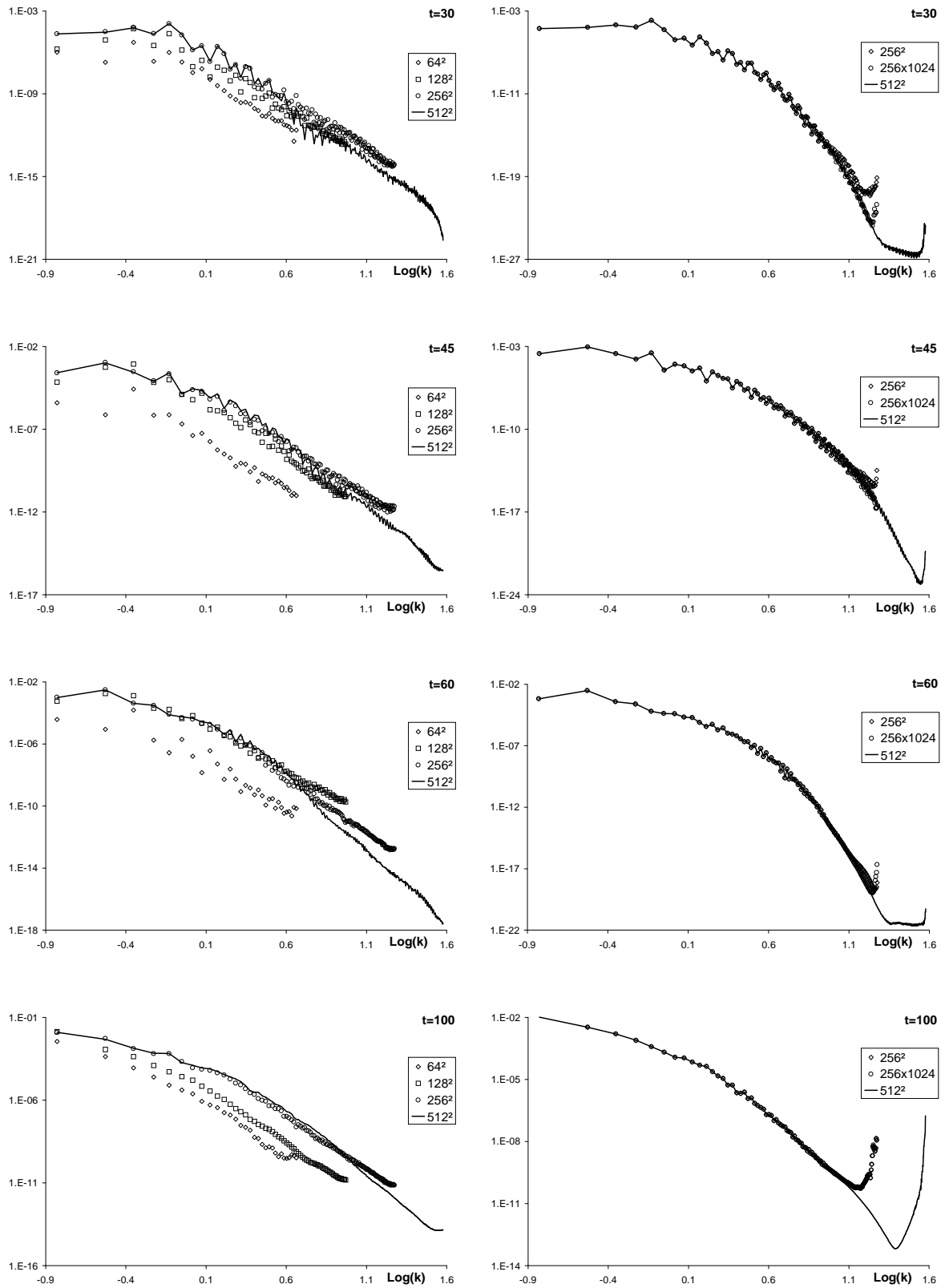


FIG. 8.18 – Spectres monodimensionnels de la vitesse longitudinale pour la couche de mélange H_2/O_2 calculée par le code WENO (gauche) et COMPACT (droite).

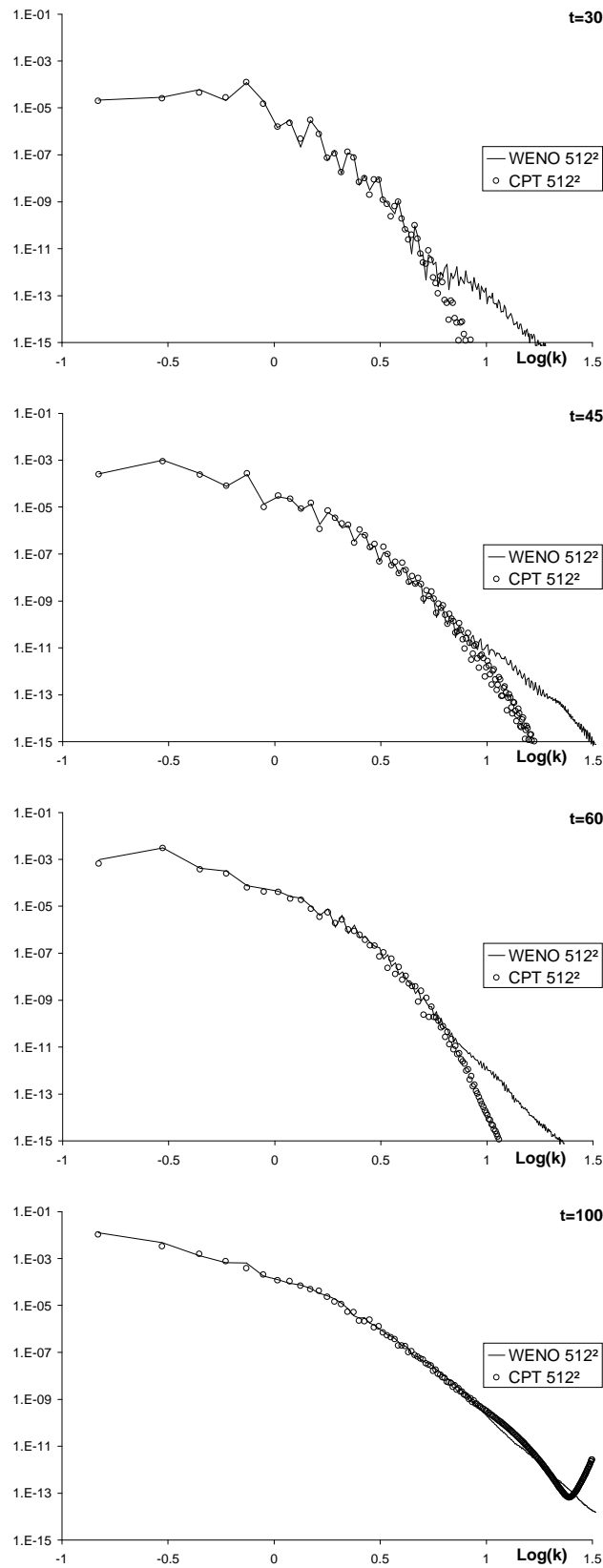


FIG. 8.19 – Comparaison des spectres monodimensionnels de la vitesse longitudinale pour la couche de mélange H_2/O_2 calculée par les codes WENO et COMPACT.

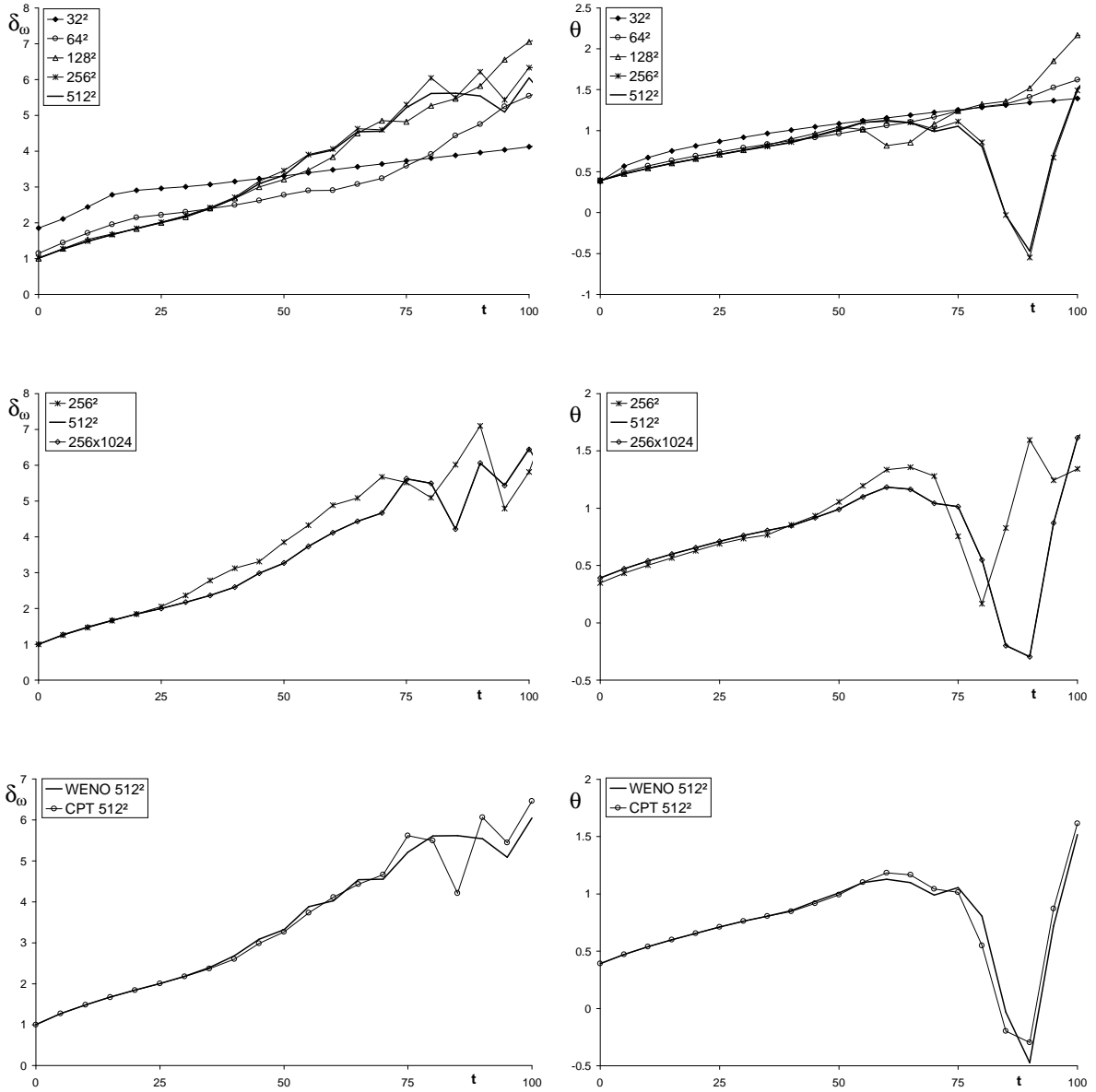


FIG. 8.20 – Épaisseurs de vorticit  (gauche) et de quantit  de mouvement (droite) pour la couche de m lange H_2/O_2 calcul e par les codes WENO (haut) et COMPACT (milieu). Comparaison des deux   512^2 en bas.

8.4 Synthèse

Dans ce chapitre nous avons mené la validation et la comparaison des codes COMPACT et WENO sur des problèmes numériques et physiques.

Les tests linéaires ont permis de mettre en évidence les caractères dispersifs et dissipatifs des méthodes. Nous en avons déduit que chacun des codes nécessite un nombre de points important dans les gradients (environ 16) afin d'en assurer correctement le transport.

Bien que les tests linéaires du transport d'une onde laissaient entrevoir un comportement dispersif de la méthode WENO, les tests non linéaires ont montré qu'en pratique le code WENO est nettement dissipatif. Le test du tube à choc a validé la forme retenue pour le solveur WENO parmi celles proposées par Shu [97].

La formulation du solveur COMPACT a été validée sur la couche de mélange compressible mono-espèce, elle s'avère plus stable et aussi précise que la forme divergente faible.

La comparaison numérique des deux codes sur le mélange de deux fluides de densité équivalente (N_2/O_2) a permis de valider mutuellement les codes COMPACT et WENO. Le code WENO est stable quel que soit le nombre de points de grille et permet d'obtenir des informations intéressantes même à faible résolution. Le code COMPACT est plus délicat d'utilisation mais nécessite moins de points que le WENO pour fournir des statistiques correctes.

L'augmentation du rapport de densité (H_2/O_2) a pour effet de rendre nettement plus complexe la structure de la solution. Le code WENO peut alors devenir excessivement dissipatif et conduire à des statistiques incorrectes à faible résolution, malgré des champs instantanés visuellement acceptables. En pratique les deux codes nécessitent une forte augmentation du nombre de points de grille par rapport au cas N_2/O_2 pour s'assurer de la cohérence des résultats.

D'une manière générale, l'absence de dissipation numérique du code COMPACT assure la qualité des résultats à condition que le calcul soit stable, alors que le code WENO fournit toujours un résultat dont la validité dépend de la résolution utilisée.

Chapitre 9

Coefficients de transport

Les coefficients de transport (viscosité, conductivité thermique, diffusivité) traduisent d'un point de vue macroscopique les échanges énergétiques microscopiques. La formulation multi-espèces de ces coefficients repose sur une analyse complexe de la théorie cinétique des gaz [43] [28]. Pour nos applications, nous limitons cette étude au cas bi-espèces gazeux peu dense détaillé par Reid et al. [85].

9.1 Formulations

Les formules théoriques issues des travaux de Hirschfelder et al. [43] sont souvent moins précises que les relations empiriques compilées par Reid et al. [85] directement déduites de mesures expérimentales, car elles reposent sur des modèles d'interaction simplifiés à l'échelle moléculaire (e.g. potentiel de Lennard-Jones) qui produisent au niveau macroscopique des erreurs de l'ordre de 10% par rapport à l'expérience.

Suivant la précision et la complexité numérique recherchées on calculera ces coefficients de plusieurs manières. Ils pourront être évalués à partir de relations empiriques complexes ou reliés les uns aux autres par différentes hypothèses, voire être considérés comme constants. Ces différents types de formulation sont détaillés dans cette section en allant du plus complexe au plus simple.

9.1.1 Relations empiriques

Les relations empiriques retenues, pour leur faible niveau d'erreur, sont simplement évoquées ici sur la base de [85].

Viscosité

Wilke donne comme relation de viscosité du mélange de deux gaz :

$$\mu = \frac{X_1}{X_1 + X_2\Phi_{12}} \mu_1 + \frac{X_2}{X_2 + X_1\Phi_{21}} \mu_2 \quad (9.1)$$

où X_i est la fraction molaire de l'espèce i , Φ une fonction de corrélation prise sous la forme suggérée par Hering et Zipperer et μ_i la viscosité partielle de l'espèce i calculée par la méthode de Chung.

Conductivité thermique

Le coefficient de conductivité thermique est basé sur la méthode de Wassiljewa, proche de celle de Wilke :

$$k = \frac{X_1}{X_1 + X_2 A_{12}} k_1 + \frac{X_2}{X_2 + X_1 A_{21}} k_2 \quad (9.2)$$

où A est la fonction de corrélation de Mason et Saxena et k_i la conductivité partielle de l'espèce i également calculée par la méthode de Chung.

Diffusivité

Le coefficient de diffusion est obtenu directement par la relation de Fuller :

$$D = 4.522 \cdot 10^{-4} \sqrt{\frac{W_1 + W_2}{2W_1W_2}} \frac{T^{7/4}}{P \left(\Sigma_{v1}^{1/3} + \Sigma_{v2}^{1/3} \right)^2} \quad (9.3)$$

où W_i est la masse molaire de l'espèce i et Σ_{vi} un volume de diffusion empirique obtenu à partir de données expérimentales (annexe A).

Application à quelques mélanges

Cette méthode empirique nous servira de référence et sera notée (i) dans la suite. En supposant qu'une répartition en tangente hyperbolique des champs de fraction massique est représentative d'une couche de mélange isotherme ($T=300K$) en régime de similarité, on a tracé en figure (9.1) la répartition des nombres de Prandtl et Schmidt du mélange pour différents couples d'espèces. Ces couples, N_2/O_2 , Ne/Ar , H_2/Ne , H_2/O_2 , présentent des rapports de densité allant de 1 environ à 16 (tab. 9.1).

Espèce	H_2	Ne	N_2	O_2	Ar
$W(g/mol)$	2	20	28	32	40

TAB. 9.1 – Masse molaire des couples d'espèces retenus

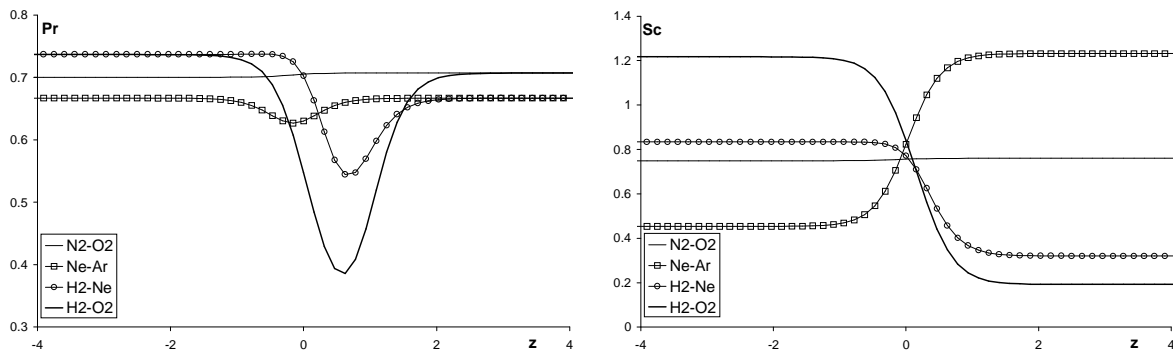


FIG. 9.1 – Évolution des nombres de Prandtl (gauche) et Schmidt (droite) pour la couche de mélange isotherme

Lorsque le rapport de densité est proche de l'unité (e.g. N_2/O_2) les nombres de Prandtl et Schmidt sont quasiment constants. Par contre, plus ce rapport augmente et plus leur

variation devient importante : rapport 2 pour le nombre de Prandtl et 6 pour le nombre de Schmidt du mélange H_2/O_2 , rendant caduques les approximations classiques de nombres de Prandtl et Schmidt du mélange constants.

9.1.2 Approximations usuelles

Plusieurs approches simplificatrices ont été envisagées afin de réduire la complexité, et donc le coût du calcul numérique des coefficients de transport.

Pr et Sc constants par espèce

L'évolution en fonction de la température des nombres de Prandtl, Schmidt et Lewis par espèce est tracée en figure (9.2) pour N_2/O_2 et H_2/O_2 .

$$Le_i = \frac{Sc_i}{Pr_i} \quad Pr_i = \frac{\mu_i C_{pi}}{k_i} \quad Sc_i = \frac{\mu_i}{\rho_{r_i}^* D}$$

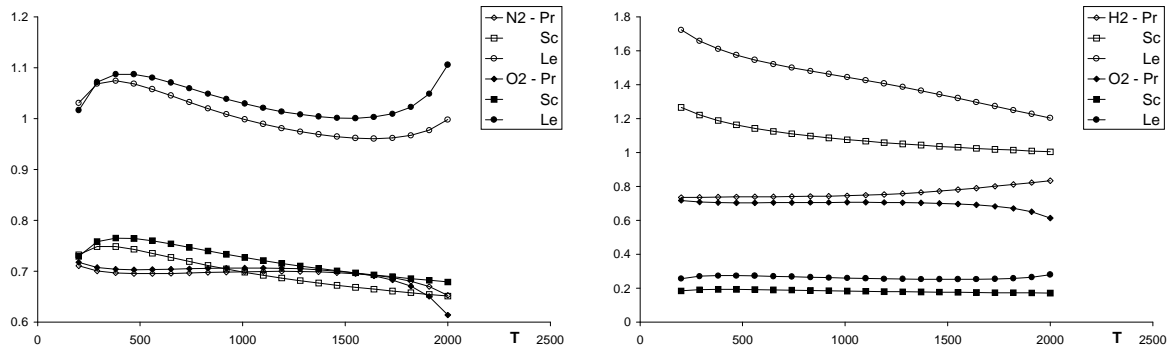


FIG. 9.2 – Effet de température sur les nombres de Prandtl et Schmidt calculés par espèce pour les couples N_2/O_2 (gauche) et H_2/O_2 (droite)

Sur la large plage de température étudiée on peut raisonnablement considérer ces nombres comme constants. Ainsi, le calcul des viscosités (μ_i) et conductivités thermiques (k_i) partielles est obtenu directement à partir de D (eq. 9.3). Les valeurs de Pr_i et Sc_i sont obtenues par les conditions initiales du problème. μ et k sont calculés par (9.1) et (9.2). Cette approche est notée (ii).

Pr et Sc constants

Une simplification supplémentaire consiste à supposer que les nombres de Prandtl et Schmidt globaux du problème sont constants, soit :

$$k = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad D = \frac{\mu}{\rho Sc}$$

où μ est obtenu à partir de (9.1). Cette approche, sans doute réductrice au vue de la figure (9.1), est notée (iii).

Coefficients constants

Enfin, la méthode la plus simple revient à considérer les coefficients de transport comme constants. A partir du calcul des valeurs partielles dans les conditions initiales on posera :

$$\mu = \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2) \quad k = \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \quad D = D\left(\frac{1}{2}(T_1 + T_2)\right)$$

Cette simplification extrême est notée (*iv*).

9.2 Comparaisons

La comparaison des différentes formulations des coefficients de transport est menée sur des cas test dynamiques 1D et 2D.

9.2.1 Tests 1D

Pour ce test monodimensionnel on considère un problème de mélange (fig. 9.3) en configuration homogène. Les répartitions initiales de température et de fraction massique sont obtenues à partir d'une distribution en double tangente hyperbolique.

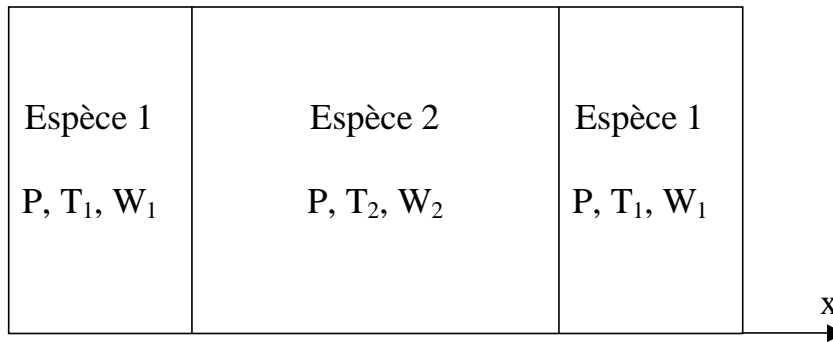


FIG. 9.3 – Représentation schématique du tube à espèce

On étudie ici trois effets : densité, température et Reynolds. En l'absence de vitesse l'interprétation physique du nombre de Reynolds est quelque peu délicate, néanmoins il permet de donner plus ou moins d'importance au terme visqueux des équations de Navier-Stokes. Les cas test considérés sont présentés en table (9.2). L'espèce 2 correspond toujours à l'oxygène. Les résultats de l'intégration du système Navier-Stokes 1D sont donnés à $t = 100$ sur le champ de densité.

Cas	N_2/O_2 #1	N_2/O_2 #2	N_2/O_2 #3	N_2/O_2 #4
	H_2/O_2 #1	H_2/O_2 #2	H_2/O_2 #3	H_2/O_2 #4
Re	100	1000	100	1000
T1 (K)	300	300	300	300
T2 (K)	300	300	1000	1000

TAB. 9.2 – Cas étudiés par le problème de mélange monodimensionnel

Cas isothermes

Les tests isothermes font principalement intervenir l'effet de diffusion de masse d'une espèce dans l'autre.

Pour un rapport de densité unitaire (cas N_2/O_2 #1 et N_2/O_2 #2) toutes les méthodes, (*ii*), (*iii*) et (*iv*), sont proches de la référence (*i*) quel que soit le nombre de Reynolds considéré (fig. 9.4).

Lorsque le rapport de densité augmente (cas H_2/O_2 #1 et H_2/O_2 #2) les hypothèses de Pr et Sc constants (*iii*) sont mises en défaut (fig. 9.5), alors que l'approche constante (*iv*) s'avère très efficace malgré sa simplicité. Ceci s'explique par la manière dont est calculé le coefficient de diffusion D (eq. 9.3). Ce coefficient dépendant principalement de la température, il demeure quasiment constant alors que l'hypothèse (*iii*) induit des variations liées aux propriétés thermodynamiques des gaz (C_p) dont l'effet va en s'atténuant avec l'augmentation du nombre de Reynolds.

Cas chauffés

La présence d'un gradient de température induit un effet thermodiffusif et un couplage fort du système d'équation.

Pour un rapport de masse molaire unitaire (cas N_2/O_2 #3 et N_2/O_2 #4) l'approche (*ii*) est toujours en bon accord avec (*i*) (fig. 9.5). (*iii*) est sensible aux valeurs des paramètres Pr et Sc . $Pr = 0.7$ et $Sc = 0.7$ donnent de très bons résultats alors que ceux pour $Sc = 1$ sont en retrait. (*ii*) est encore proche de (*i*) et donne des résultats acceptables compte tenu de la simplicité de la méthode, d'autant qu'à plus haut nombre de Reynolds toutes les approches sont identiques.

A plus haut rapport de densité (cas H_2/O_2 #3 et H_2/O_2 #4) seule (*ii*) reste en excellent accord avec (*i*) (fig. 9.7). Les autres approches montrent leurs limites à faible nombre de Reynolds.

Synthèse

Ces tests monodimensionnels simples ont permis de tester la validité des différentes hypothèses simplificatrices (*ii*), (*iii*) et (*iv*) du calcul des coefficients de transport en référence à (*i*).

En écoulement isotherme l'approche constante (*iv*) s'avère très efficace malgré sa simplicité, quel que soit le rapport de densité considéré.

Lorsque l'un des gaz est chauffé, seule (*ii*) est efficace. Les valeurs de Pr et Sc de l'hypothèse (*iii*) deviennent difficiles à calibrer lorsque le rapport de densité augmente. On notera cependant que toutes ces approches sont similaires lorsque le nombre de Reynolds augmente.

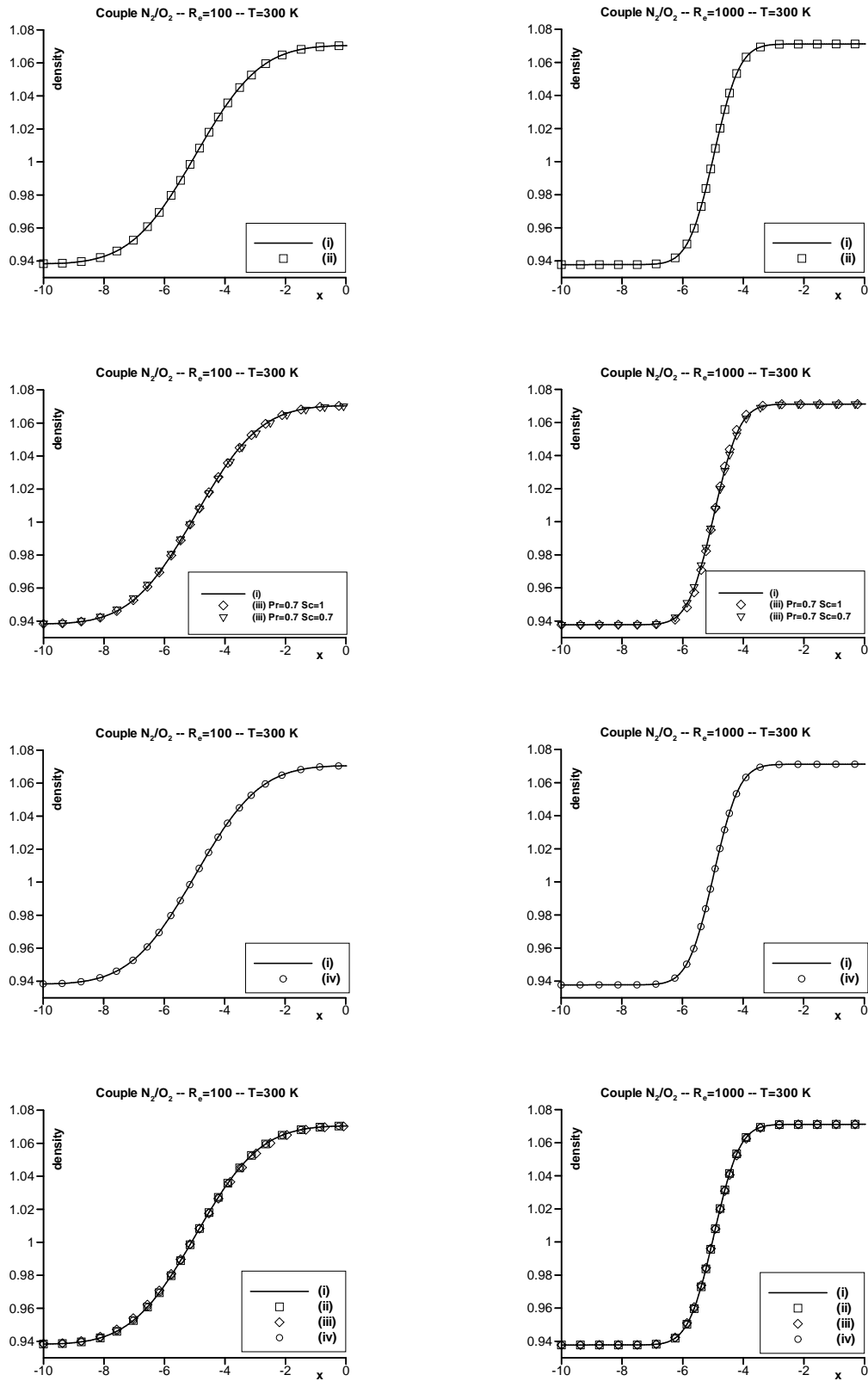


FIG. 9.4 – Test de la formulation des coefficients de transport pour le mélange N_2/O_2 isotherme à $Re=100$ (gauche) et $Re=1000$ (droite).

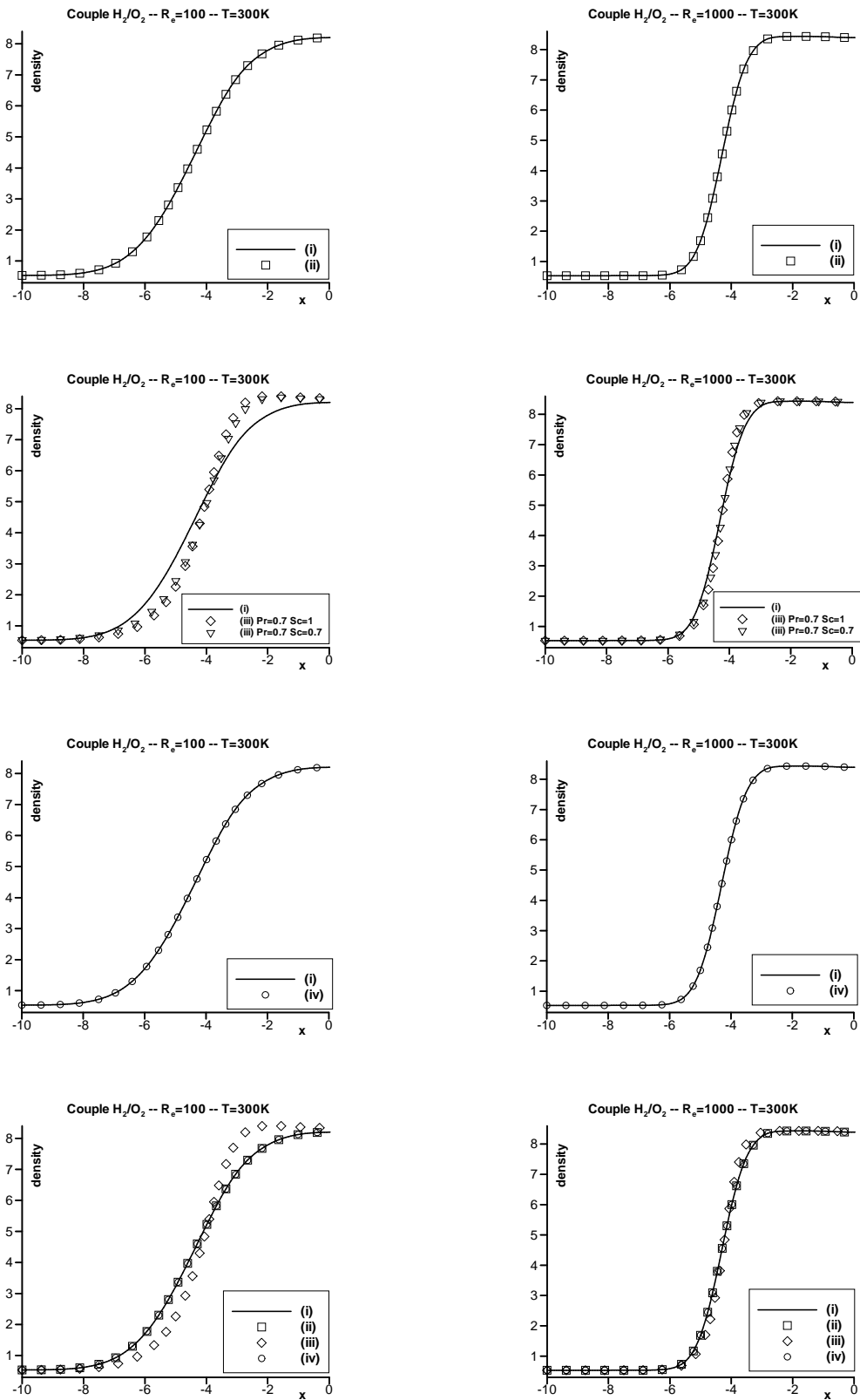


FIG. 9.5 – Test de la formulation des coefficients de transport pour le mélange H_2/O_2 isotherme à $Re=100$ (gauche) et $Re=1000$ (droite).

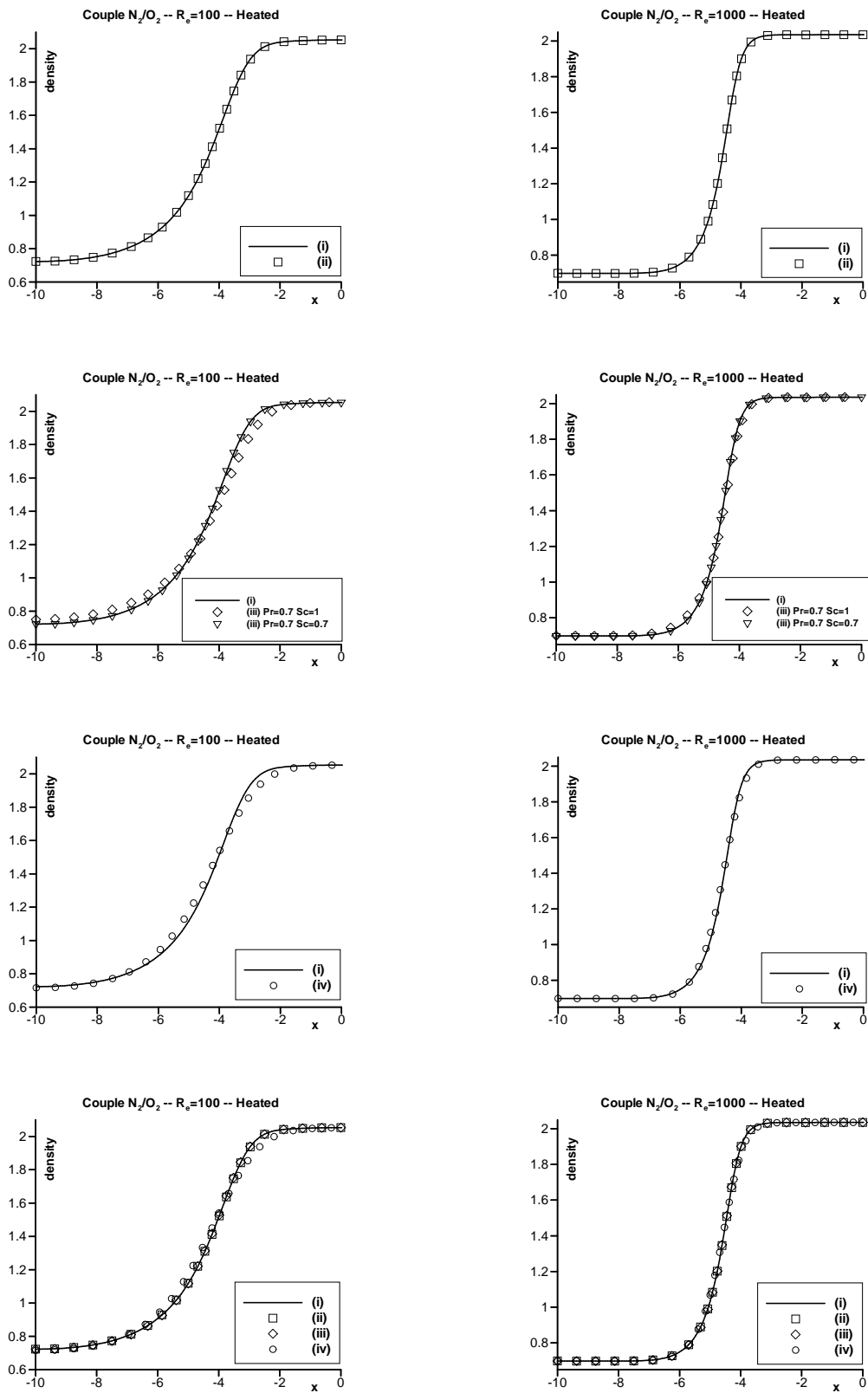


FIG. 9.6 – Test de la formulation des coefficients de transport pour le mélange N_2/O_2 chauffé à $Re=100$ (gauche) et $Re=1000$ (droite).

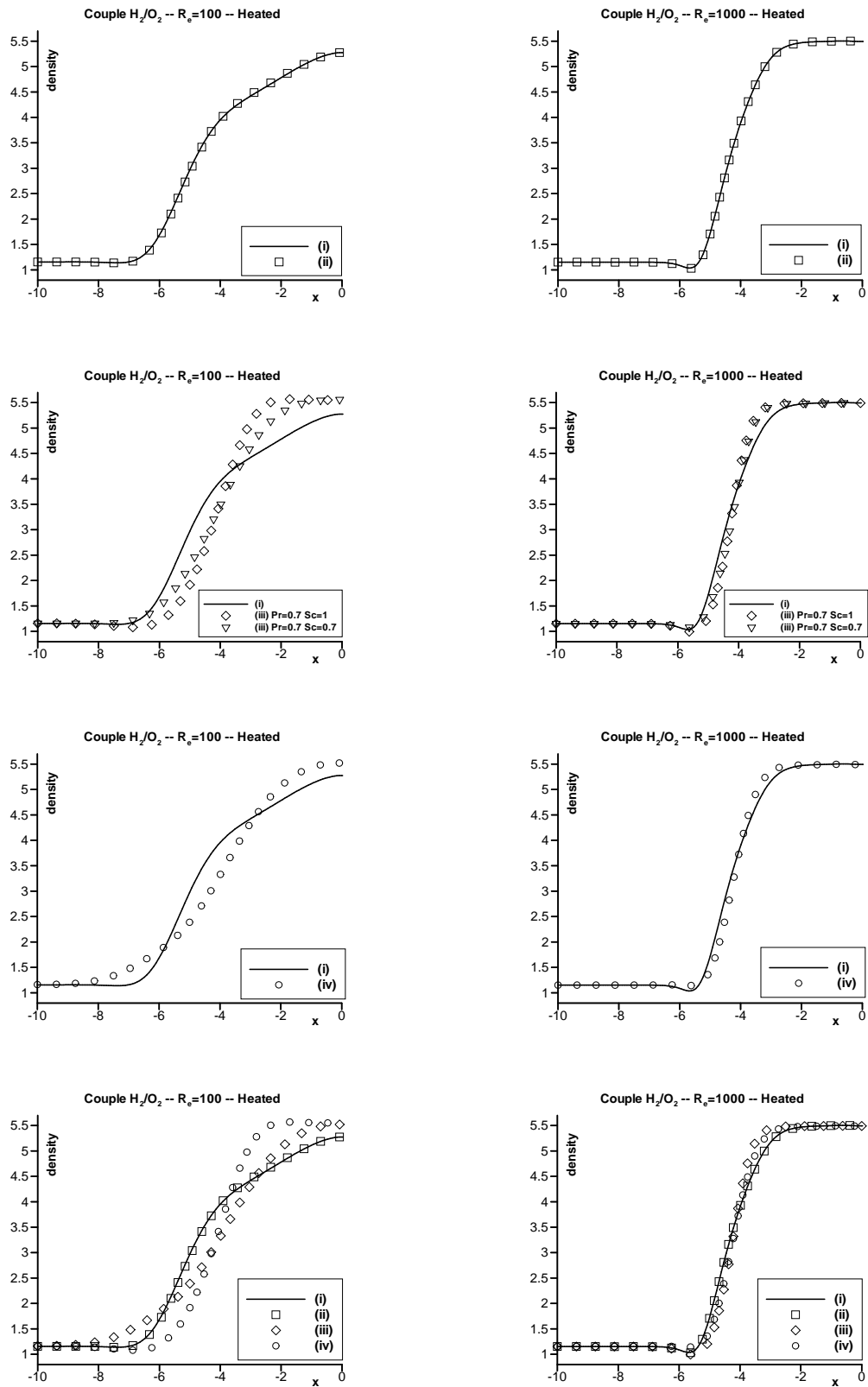


FIG. 9.7 – Test de la formulation des coefficients de transport pour le mélange H_2/O_2 chauffé à $Re = 100$ (gauche) et $Re = 1000$ (droite).

9.2.2 Tests 2D

Les tests bidimensionnels sont menés sur l'évolution temporelle de la couche de mélange H_2/O_2 . On considère le mélange isotherme ($T = 300K$) de deux couches à $\pm 100m/s$, à faible nombre de Reynolds ($Re = 100$), pour une résolution de 256×512 points. Seuls les résultats de (iv) sont comparés à (i), (ii) étant identique à (i) et (iii) écarté par les conclusions des tests 1D.

Grandeurs statistiques

Les épaisseurs statistiques de vorticit  et de quantit  de mouvement sont trac es en figure (9.8).

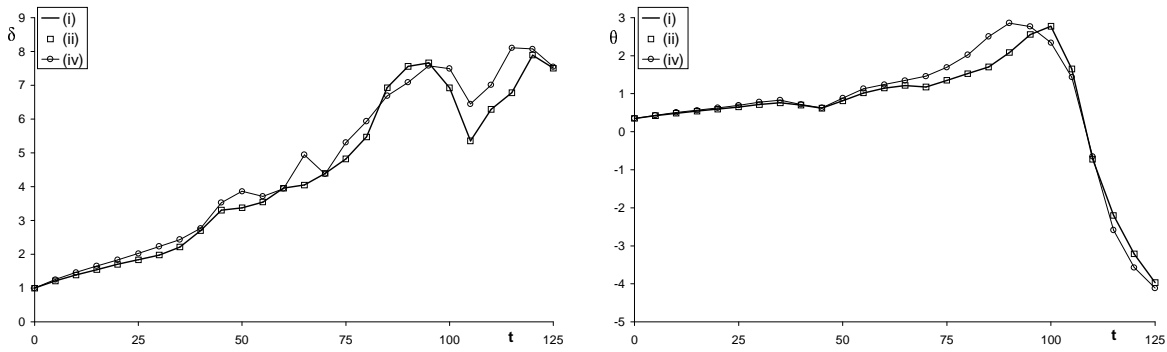


FIG. 9.8 –  volution temporelle des  paisseurs de vorticit  (gauche) et de quantit  de mouvement (droite) de la couche de m lange H_2/O_2 isotherme calcul e avec les coefficients de transport variables (i), approch s (ii) et constants (iv).

Bien que l' coulement soit isotherme et que les tests 1D soient tr s positifs, on constate un l ger  cart entre les courbes. Cette faible diff rence influe peu sur les spectres de vitesse longitudinale (fig. 9.9). Les petits nombres d'onde ont un contenu  nerg tique  quivalent et la pente des spectres est comparable sur toute la gamme d' chelles.

Champs instantan s

La comparaison visuelle des champs de fraction massique obtenus par (iv) est  galement en bon accord global avec (i). A $t = 35$, l' mergence des instabilit s de Kelvin-Helmholtz est bien pr dite, ainsi que les premiers appariements tourbillonnaires   $t = 70$. De l g res diff rences sur le d tail des structures coh rentes apparaissent apr s un long temps d'int gration, lorsque la bo te de calcul est satur e   $t = 105$ et $t = 125$.

Synth se

Compte tenu de la bonne qualit  des r sultats sur cette simulation bidimensionnelle   fort rapport de densit , nous avons choisi de retenir la formulation constante (iv) qui diminue grandement le co t num rique du calcul des coefficients de transport comparativement   (i) pour les SND. Cette hypoth se se justifie principalement pour assurer la faisabilit  des calculs tridimensionnels en vue de l' tablissement des ordres de grandeur des termes filtr s des  quations de Navier-Stokes (3.18)–(3.34).

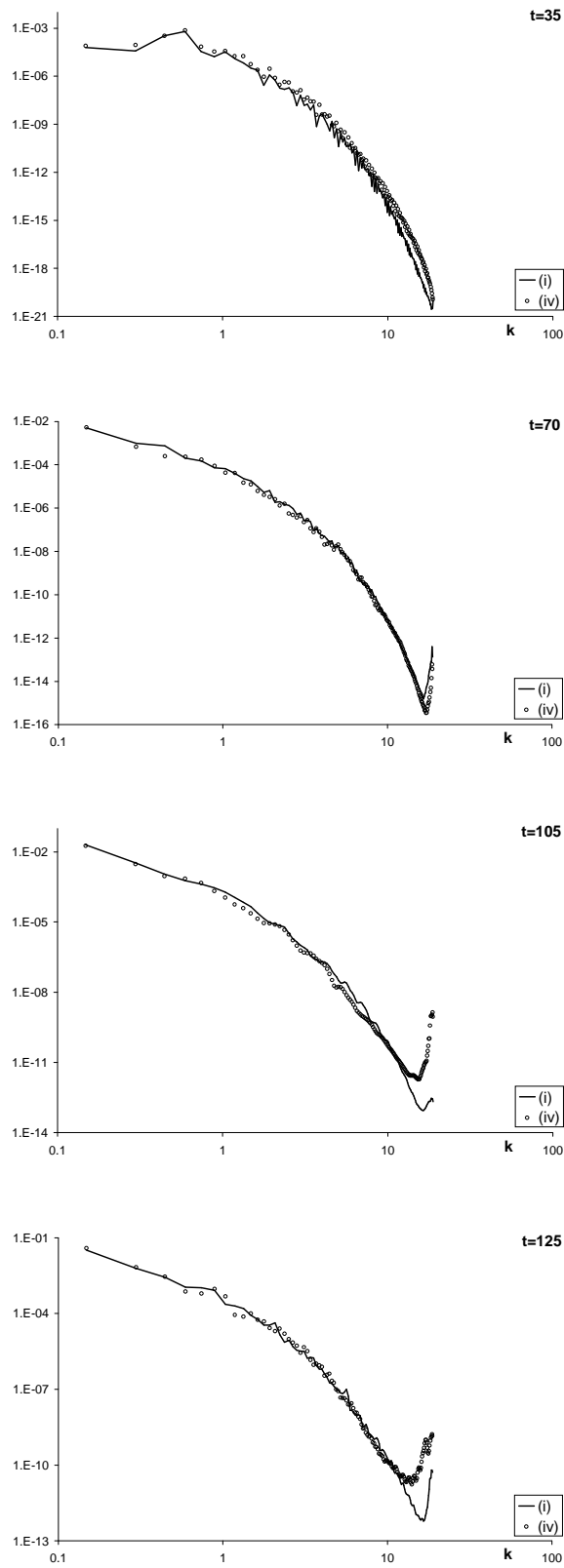


FIG. 9.9 – Spectres de vitesse longitudinale de la couche de mélange H_2/O_2 isotherme calculée avec les coefficients de transport variables (i) et constants (iv), à $t = 35$, $t = 70$, $t = 105$ et $t = 125$.

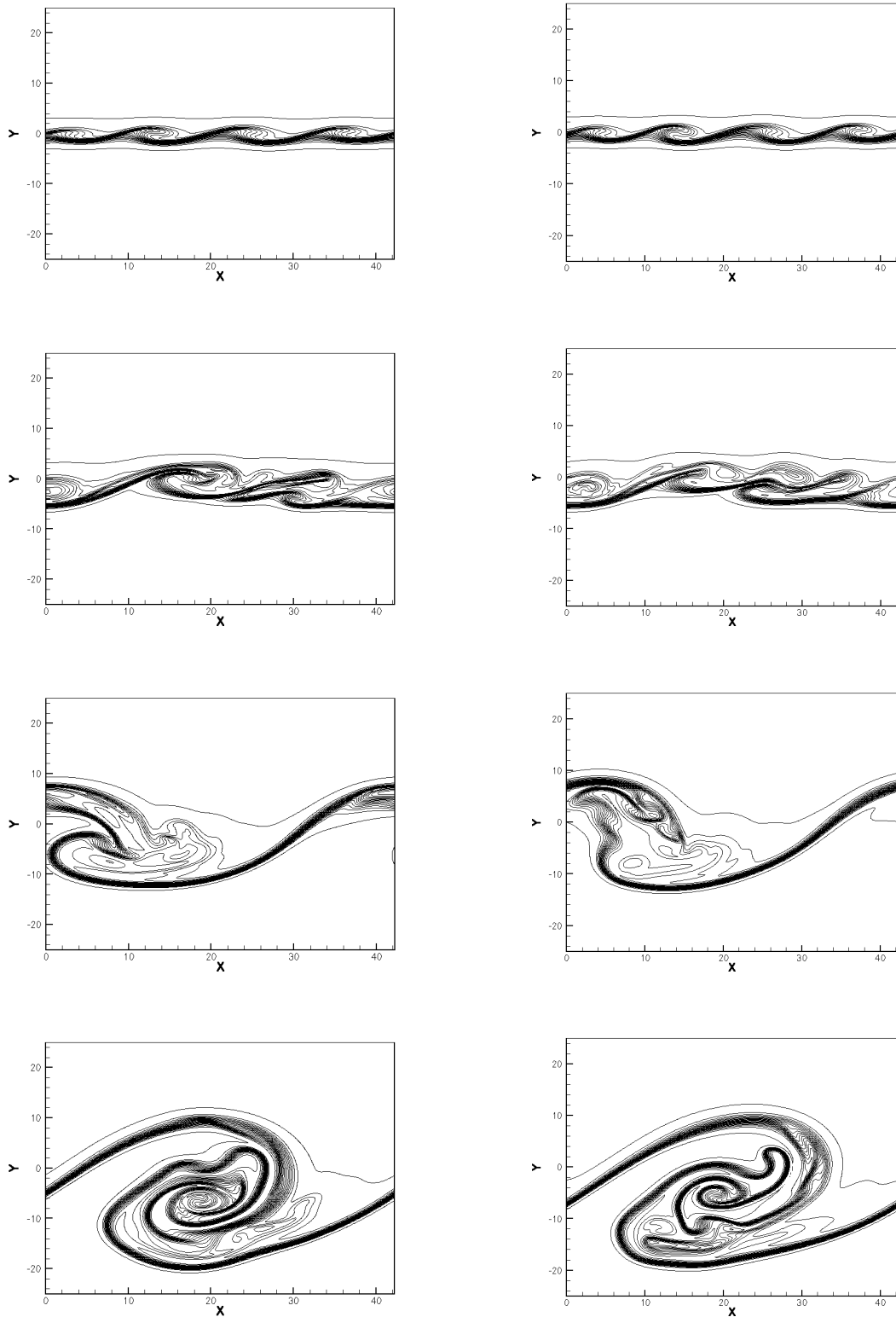


FIG. 9.10 – Iso-valeurs du champ de fraction massique d’oxygène pour la couche de mélange H_2/O_2 isotherme calculée avec les coefficients de transport variables (*i*) (à gauche) et constants (*iv*) (à droite), à $t = 35$, $t = 70$, $t = 105$ et $t = 125$.

Troisième partie

La couche de mélange bi-espèce

Chapitre 10

Conditions initiales

L'étude numérique de la transition à la turbulence nécessite d'imposer des conditions initiales et aux limites réalistes, c'est-à-dire physiquement acceptables afin de reproduire les observations expérimentales [80]. En pratique, toute grandeur numérique initiale ϕ est formée par superposition d'une solution de base (ou laminaire) ϕ_b et d'une perturbation ϕ' de faible amplitude dont le rôle est de forcer la transition à la turbulence par déstabilisation de l'écoulement :

$$\phi = \phi_b + \phi'$$

Les études expérimentales de Bradshaw [12] et numériques de Sandham & Reynolds [92] montrent que la couche de mélange est très sensible aux conditions initiales. Pour cela on la qualifie parfois d'amplificateur d'instabilité. L'objet de cette partie est de définir théoriquement les conditions initiales utilisées pour la suite de l'étude de la couche de mélange bi-espèces et d'en établir les propriétés de stabilité. On s'intéresse principalement à la formulation de la solution de base, la forme de la perturbation est simplement évoquée.

On suppose dans toute la suite que lorsque $y \rightarrow -\infty$ le fluide est composé du gaz 2 uniquement et possède les caractéristiques locales u_2, v_2, T_2, Y_2 , soit $Y = 0$ (avec la formulation retenue pour les équations de Navier-Stokes (1.8)–(1.11)). Inversement, lorsque $y \rightarrow +\infty$ seul le gaz 1 est présent et le fluide possède les caractéristiques locales u_1, v_1, T_1, Y_1 , soit $Y = 1$.

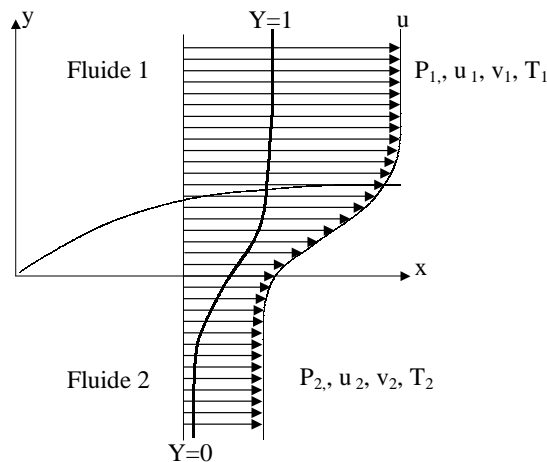


FIG. 10.1 – Représentation schématique des paramètres de la couche de mélange en similitude

10.1 Formulation en tangente hyperbolique

Classiquement, la solution de base adoptée pour le champ de vitesse longitudinale est une tangente hyperbolique [77]. Cette forme est acceptable en première approximation pour le profil de vitesse longitudinale en régime d'auto-similarité, au moins dans le cas incompressible.

10.1.1 Principe de base

Pour le cas bi-espèce temporel plan, en étendant la forme hyperbolique au champ de fraction massique, on imposera comme profils de base dans un cas isotherme :

$$\begin{aligned}
 u &= U \operatorname{th}(2y/L_{ref}) & v &= 0 \\
 Y &= (1 + \operatorname{th}(2y/L_{ref}))/2 & r &= r_2 + (r_1 - r_2)Y \\
 T &= T_0 = \text{cste} & \text{ou } T &= T_0 + (1 - u^2)/(2C_p) \\
 P &= P_0 = \text{cste} & \rho &= P_0/(rT)
 \end{aligned}$$

Avec cette définition, la longueur de référence est directement reliée à l'épaisseur de vorticité initiale (fig. 10.2), $L_{ref} = \delta_0$ où $\delta_0 = \frac{2U}{|\partial u/\partial y|_{max}}$.

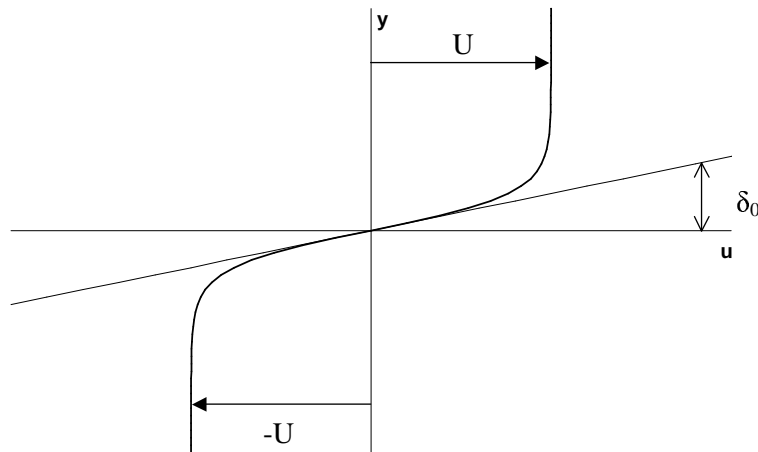


FIG. 10.2 – Représentation graphique de l'épaisseur de vorticité initiale

La forme de ces profils est donnée en figure (10.3) pour les couples N_2/O_2 (gauche) et H_2/O_2 (droite). Le rapport de densité intervient principalement sur les expressions de r et C_p et donc indirectement sur la forme des profils de densité et de température.

10.1.2 Ondes de pression

La réponse acoustique de l'opérateur Navier-Stokes, au jeu de conditions initiales détaillées en table 10.1, est représentée en figure (10.4).

Lx/L_{ref}	Ly/L_{ref}	N_x	N_y	U	T	Re
14	20	64	256	100 m/s	300 K	100

TAB. 10.1 – Paramètres de calcul pour les couples N_2/O_2 et H_2/O_2

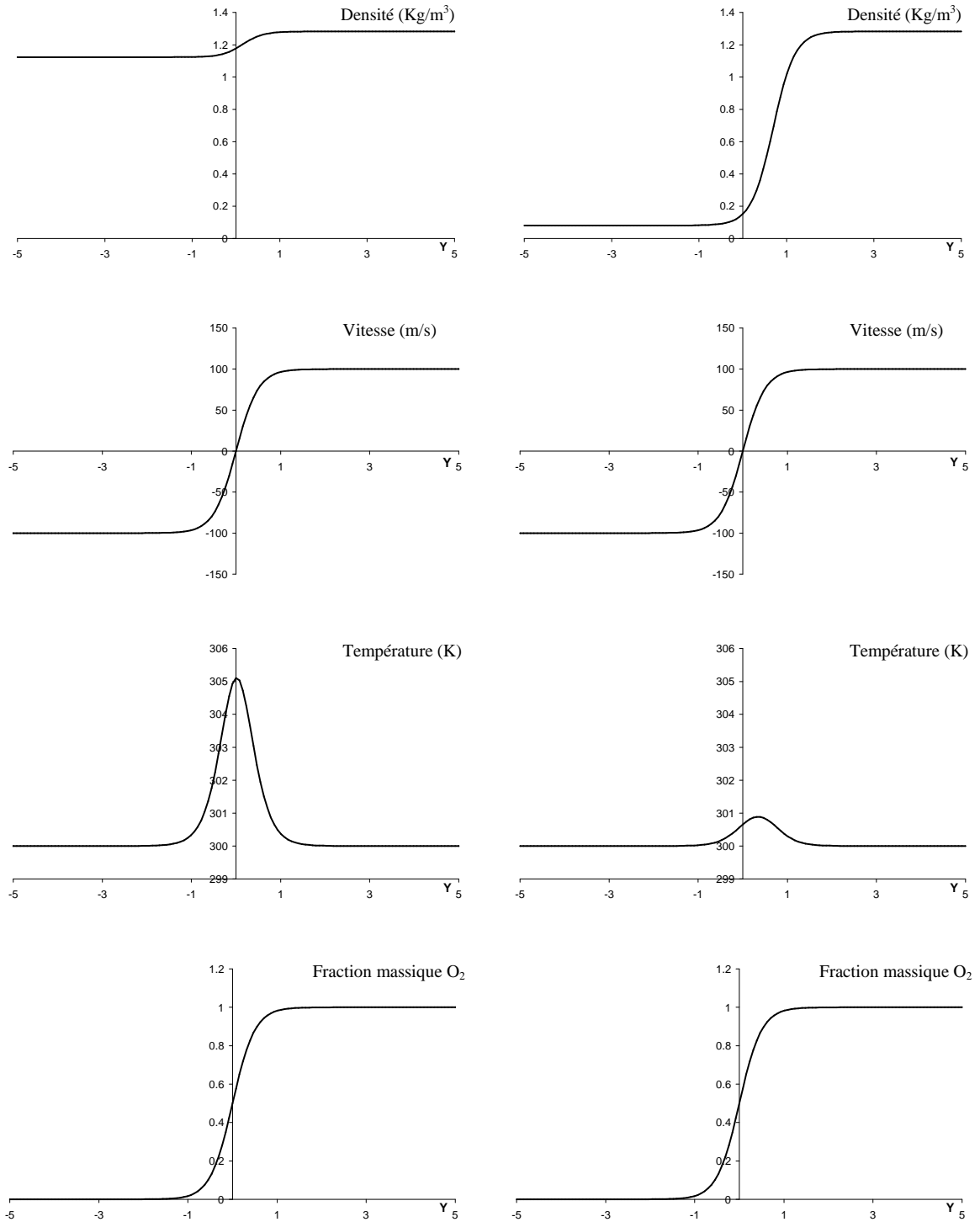


FIG. 10.3 – Profils initiaux de la couche de mélange pour les couples N_2/O_2 (gauche) et H_2/O_2 (droite)

Pour le couple N_2/O_2 , les ondes de pression évoluent de manière quasi symétrique, les vitesses du son dans chacun des gaz étant très proches. En revanche, pour le mélange H_2/O_2 on observe une forte dissymétrie du système, les ondes les plus rapides (côté H_2) ont une amplitude nettement moins importante que du côté oxygène.

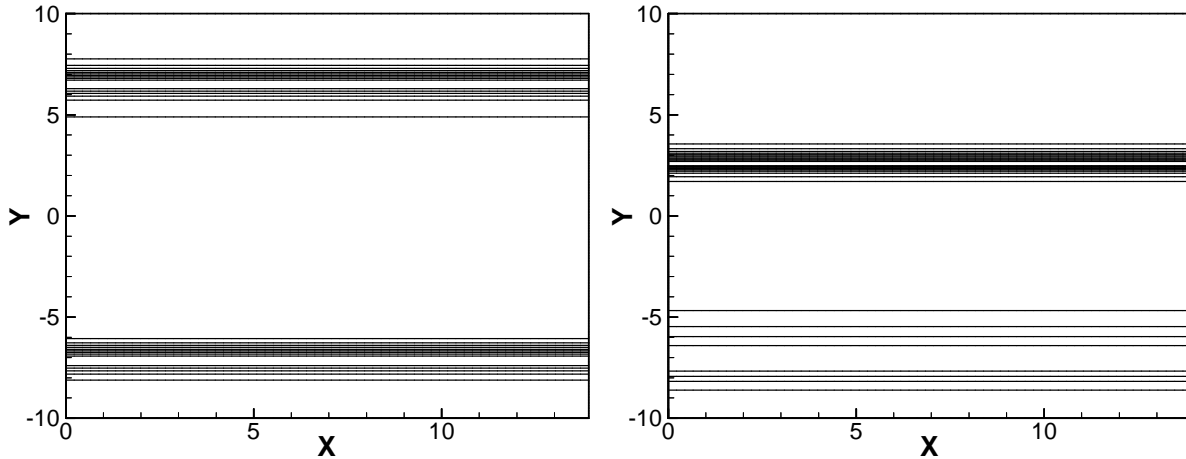


FIG. 10.4 – Ondes de pression pour les couples N_2/O_2 à $t=2$ (gauche) et H_2/O_2 à $t=0.6$ (droite)

L'amplitude relative de ces ondes est tracée en figure (10.5) pour une abscisse fixée.

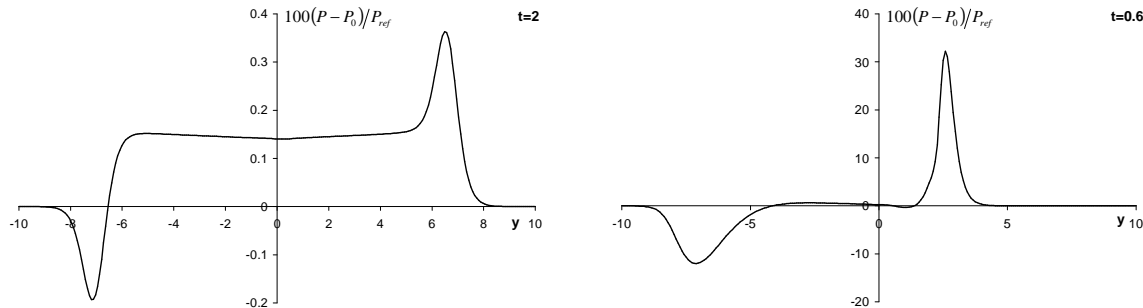


FIG. 10.5 – Amplitude relative des ondes de pression pour les couples N_2/O_2 à $t=2$ (gauche) et H_2/O_2 à $t=0.6$ (droite)

Van Kalmthout et al [110] notent que cette réponse acoustique peut conduire à des instabilités de calcul lors de l'utilisation de schémas non dissipatifs du type compact.

10.2 Similitude temporelle

Pour les simulations bi-espèces à haut rapport de densité, nous avons choisi de lever ce problème d'ondes acoustiques en utilisant des conditions initiales aussi proches que possible de solutions des équations de Navier-Stokes.

En pratique, l'utilisation des résultats issus de la similitude spatiale (détaillée en annexe D) comme conditions initiales de la couche de mélange temporelle n'est pas envisageable. En effet, l'approche spatiale implique une évolution longitudinale des profils, incompatible avec la condition de périodicité du cas temporel. Un travail semi-analytique original a donc été mené afin de développer une version *temporelle* de la formulation en similitude.

10.2.1 Hypothèses de base

Effectuer un calcul temporel, où x est la direction homogène (fig. D.1), revient d'un point de vue topographique à se déplacer sur un domaine cylindrique (fig. 10.6). La notion de périodicité étant indépendante de la longueur du domaine, on recherche un champ initial indépendant du rayon r du cylindre considéré, c'est-à-dire dépendant uniquement des variables (t, y) .

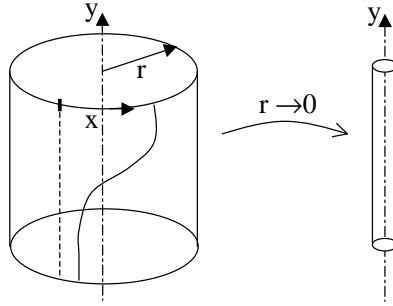


FIG. 10.6 – Représentation du domaine de calcul d'une couche de mélange temporelle

Les hypothèses de base de la similitude temporelle sont donc :

- écoulement plan
- écoulement instationnaire
- $\partial/\partial x = 0$
- $v \ll u$

10.2.2 Équations du problème

Partant des équations de Navier-Stokes sous forme convective-primitive (1.8)–(1.11), les hypothèses précédentes conduisent au système :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (10.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial \tau_{uv}}{\partial y} \quad (10.2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{vv}}{\partial y} \quad (10.3)$$

$$\begin{aligned} \rho \overline{C_v} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= -p \frac{\partial v}{\partial y} + \tau_{uv} \frac{\partial u}{\partial y} + \tau_{vv} \frac{\partial v}{\partial y} \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) - (C_{p1} - C_{p2}) J_y \frac{\partial T}{\partial y} - (r_1 - r_2) T \frac{\partial J_y}{\partial y} \end{aligned} \quad (10.4)$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y}{\partial t} + v \frac{\partial Y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial J_y}{\partial y} \quad (10.5)$$

avec,

$$\tau_{uv} = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \quad \tau_{vv} = \frac{4}{3} \mu \frac{\partial v}{\partial y}$$

On se ramène à une écriture classique des équations en introduisant une vitesse de convection constante U reliant longueur et temps :

$$x = U \cdot t$$

L'adimensionnement des équations permet d'extraire les ordres de grandeur de chacun des termes et de ne retenir que les plus importants. Les grandeurs de référence (indiquées ref) sont définies telles que :

$$\begin{aligned} u &= \tilde{u} \cdot u_{ref} & v &= \tilde{v} \cdot v_{ref} & U &= \tilde{U} \cdot U_{ref} \\ x &= \tilde{x} \cdot x_{ref} & y &= \tilde{y} \cdot y_{ref} \\ T &= \tilde{T} \cdot T_{ref} & p &= \tilde{p} \cdot p_{ref} & \rho &= \tilde{\rho} \cdot \rho_{ref} \end{aligned}$$

L'équation de continuité (10.1) conduit alors à :

$$\frac{x_{ref}}{y_{ref}} = \frac{U_{ref}}{v_{ref}} \quad (10.6)$$

Pour la suite on suppose que l'on s'intéresse à des temps d'étude suffisamment grands et on choisit :

$$U_{ref} = u_{ref}$$

L'équation de Bernoulli pour la pression impose :

$$p_{ref} = \rho_{ref} u_{ref}^2 \quad (10.7)$$

L'équation de quantité de mouvement selon x (10.2) est directement écrite sous sa forme finale.

L'équation de quantité de mouvement selon y (10.3) fait apparaître le nombre de Reynolds $Re_{y,v} = \frac{\rho_{ref} v_{ref} y_{ref}}{\mu_{ref}}$:

$$-\frac{\partial \tilde{p}}{\partial \tilde{y}} = \left(\frac{v_{ref}}{u_{ref}} \right)^2 \left[\tilde{\rho} \tilde{U} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} - \frac{1}{Re_{y,v}} \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\tilde{\mu} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{y}} \right) \right]$$

et devient au premier ordre :

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (10.8)$$

De même pour les équations (10.4) et (10.5).

Au final, le système à résoudre se résume à :

$$\frac{\partial \rho U}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (10.9)$$

$$\rho \left(U \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (10.10)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (10.11)$$

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(U \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= -p \frac{\partial v}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu C_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &+ (C_{p1} - C_{p2}) \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + (r_1 - r_2) T \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (10.12)$$

$$\rho \left(U \frac{\partial Y}{\partial x} + v \frac{\partial Y}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial y} \right) \quad (10.13)$$

Ce système est proche de celui obtenu en formulation spatiale (D.1) – (D.5) et est résolu sur le même principe.

10.2.3 Solution auto-semblable

Comme dans le cas spatial on effectue un changement de variables afin de passer en coordonnées de similitude. La fonction de courant compressible ψ est introduite à partir de sa définition :

$$\rho U = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad ; \quad \rho v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

et le changement de variables est le même que pour la transformation d'Illingworth :

$$x = x(\xi), \quad y = y(\xi, \eta) \quad (10.14)$$

$$\xi = \xi(x), \quad \eta = \eta(x, y) \quad (10.15)$$

Le découplage des variables pour la fonction de courant $\psi = F(\xi)G(\eta)$ et les inconnues :

$$u(\xi, \eta) = u_1(\xi) f'(\eta) \quad (10.16)$$

$$\rho(\xi, \eta) = \rho_1(\xi) g'(\eta) \quad (10.17)$$

$$T(\xi, \eta) = T_1(\xi) \theta(\eta) \quad (10.18)$$

$$Y(\xi, \eta) = Y(\eta) \quad (10.19)$$

peut conduire à la transformation classique de Levy-Lees :

$$F(\xi) = \sqrt{2\xi}, \quad G(\eta) = f(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} \frac{u}{u_1} d\eta' + f(-\infty) \quad (10.20)$$

$$\xi = \int_{x_0}^x \rho_1 u_1 \mu_1 dx' + \xi_0, \quad \eta = \frac{u_1}{F(\xi)} \int_{y_0}^y \rho dy' + \eta_0 \quad (10.21)$$

ou alternativement à la transformation originale suivante, offrant une correspondance linéaire pour (10.14)–(10.15) si les grandeurs u_1 , μ_1 et ρ_1 sont constantes :

$$F(\xi) = \sqrt{2\xi}, \quad G(\eta) = g(\eta) = \int_{-\infty}^{\eta} \frac{\rho}{\rho_1} d\eta' + g(-\infty) \quad (10.22)$$

$$\xi = \rho_1 \mu_1 U (x - x_0), \quad \eta = \frac{\rho_1 U}{F(\xi)} (y - y_0) \quad (10.23)$$

La vitesse transversale s'exprime alors simplement par :

$$v = \frac{U}{2} \left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right) - \frac{\sqrt{\rho_1 \mu_1 U}}{\sqrt{2(x - x_0)}} \left(\frac{g}{\rho} \right) \quad (10.24)$$

En injectant (10.16)–(10.19) et (10.22) (10.23) dans (10.9)–(10.13) on obtient le système d'équations différentielles ordinaires pour la similitude temporelle, complété par l'équation

d'état :

$$(Cf'')' = -gf'' \quad (10.25)$$

$$\left(C_p \frac{C}{Pr} \theta'\right)' = -\left(C_p g + \frac{C}{Sc} (C_{p1} - C_{p2}) Y'\right) \theta' - C \frac{u_1^2}{T_1} f''^2 \quad (10.26)$$

$$\left(\frac{C}{Sc} Y'\right)' = -gY' \quad (10.27)$$

$$g' = \frac{p}{\rho_1 r T_1} \frac{1}{\theta} \quad (10.28)$$

$C = \mu/\mu_1$ remplace le paramètre de Chapman-Rubensin de l'approche spatiale.

10.2.4 Conditions aux limites

Résoudre le système (10.25)–(10.28) consiste à déterminer : f' , θ , Y et g . Il s'agit donc d'un système d'ordre 7 auquel on doit rattacher les conditions aux limites physiques suivantes (liées par l'équation d'état) :

$$\eta \rightarrow -\infty : \begin{cases} f' & \rightarrow \beta_u = \frac{u_2}{u_1} = -1 \\ g' & \rightarrow \beta_\rho = \frac{\rho_2}{\rho_1} \\ Y & \rightarrow 0 \\ \theta & \rightarrow \beta_T = \frac{T_2}{T_1} \end{cases} \quad (10.29)$$

$$\eta \rightarrow +\infty : \begin{cases} f' & \rightarrow 1 \\ g' & \rightarrow 1 \\ Y & \rightarrow 1 \\ \theta & \rightarrow 1 \end{cases} \quad (10.30)$$

10.2.5 Résolution numérique

L'intégration du système (10.25)–(10.28) est effectuée à l'aide d'une méthode de tir basée sur un schéma Runge-Kutta d'ordre 4, démarrée grâce à une analyse asymptotique du système en $\eta \rightarrow -\infty$ [47]. Le comportement asymptotique des inconnues est proche de celui du cas spatial :

$$f'' = Q'_u \quad (10.31)$$

$$f' = \beta_u + Q_u \quad (10.32)$$

$$f = f_0 + \beta_u \eta + \int Q_u d\eta \quad (10.33)$$

$$g = g_0 + \beta_\rho \eta + \int Q_\rho d\eta \quad (10.34)$$

$$\theta' = Q'_\theta \quad (10.35)$$

$$\theta = \beta_T + Q_\theta \quad (10.36)$$

$$Y' = Q'_Y \quad (10.37)$$

$$Y = Q_Y \quad (10.38)$$

Les fonctions Q_u , Q_ρ , Q_θ , Q_Y représentent le comportement asymptotique des variables d'intégration, elles s'annulent en $-\infty$ ainsi que leurs dérivées. En injectant ces expressions (10.31)–(10.38) dans le système (10.25)–(10.27) on obtient après linéarisation et intégration :

$$Q_u = \alpha_u \frac{\beta_\rho}{\eta\beta_\rho + g_0} \exp \left\{ -\frac{\beta_\rho}{2C} \left(\eta + \frac{g_0}{\beta_\rho} \right)^2 \right\} \quad (10.39)$$

$$Q_\theta = \alpha_T \frac{\beta_\rho}{\eta\beta_\rho + g_0} \exp \left\{ -\frac{\beta_\rho Pr}{2C} \left(\eta + \frac{g_0}{\beta_\rho} \right)^2 \right\} \quad (10.40)$$

$$Q_Y = \alpha_Y \frac{\beta_\rho}{\eta\beta_\rho + g_0} \exp \left\{ -\frac{\beta_\rho Sc}{2C} \left(\eta + \frac{g_0}{\beta_\rho} \right)^2 \right\} \quad (10.41)$$

où les constantes α_u , α_T et α_Y sont les paramètres de tir, déterminés numériquement *via* une procédure de Newton afin de satisfaire les conditions (10.30). Le domaine d'intégration, théoriquement $]-\infty; +\infty[$, est réduit numériquement à $\eta \in [\eta_{-\infty}; \eta_{+\infty}]$.

A ce stade, f_0 peut être choisi arbitrairement puisqu'il n'intervient pas dans la procédure de tir et n'affecte donc pas la solution. Par contre, la valeur de g_0 , relative au rapport de densité, est toujours indéterminée. Sa détermination, associée au problème de la "*troisième condition*" [47], permet de fixer la solution cherchée. Pour l'approche temporelle, nous avons choisi de suivre la suggestion de Von Kàrmàn qui consiste à chercher la solution du système qui annule la force transversale s'exerçant sur la couche de mélange.

L'intégration des équations de Navier-Stokes, sur un volume de contrôle V de frontières ∂V et de normale extérieure \vec{n} , conduit pour la quantité de mouvement à :

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{U}) dV + \int_{\partial V} \rho \vec{U} (\vec{U} \cdot \vec{n}) dS = \int_{\partial V} -p \vec{n} dS + \int_{\partial V} \vec{\tau} \cdot \vec{n} dS \quad (10.42)$$

Ce qui conduit dans notre cas, en projection selon y compte tenu de l'annulation des dérivées et de l'égalité des pressions en $\pm\infty$, à :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) dy + \rho_1 v_1^2 - \rho_2 v_2^2 = 0 = F_y \quad (10.43)$$

La force transversale, notée F_y , sera nulle si on arrive à vérifier l'égalité (10.43). En introduisant la relation :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho v) = \frac{(\rho_1 \mu_1 U)^2}{2\xi \sqrt{2\xi}} (g - \eta g' - \eta^2 g'')$$

et en prenant les limites de (10.24) aux bornes d'intégration, cela revient d'un point de vue numérique à résoudre :

$$g_0^2 + \beta_\rho \eta_{-\infty} g_0 + \beta_\rho g_{+\infty} (g_{+\infty} - \eta_{+\infty}) = 0 \quad (10.44)$$

Cependant, g_0 ne peut être obtenu directement à partir de (10.44) car la valeur de $g_{+\infty}$ ($= g(\eta_{+\infty})$) dépend elle-même de g_0 . On a donc recourt à un processus itératif pour

satisfaire (10.43) et on vérifie *a posteriori* que la valeur déterminée pour g_0 est cohérente avec (10.44).

De retour en coordonnées physiques, grâce à la correspondance (10.23), on fixe le temps (où l'abscisse) auquel on désire obtenir la forme de la solution en se donnant l'épaisseur de vorticit  initiale :

$$\delta_0 = \frac{\Delta U}{|\partial u / \partial y|_{max}}$$

Soit, en inversant cette relation :

$$t - t_0 = \frac{x - x_0}{U} = \frac{\rho_1}{2\mu_1} \left(\frac{u_1 \delta_0}{\Delta U} \max \{f''\} \right)^2$$

L'origine y_0 de la coordonn e transversale est associ e   la valeur maximale du gradient de vitesse longitudinale u .

Un arbre algorithmique simplifi  du principe de r solution est repr sent  en figure (10.7).

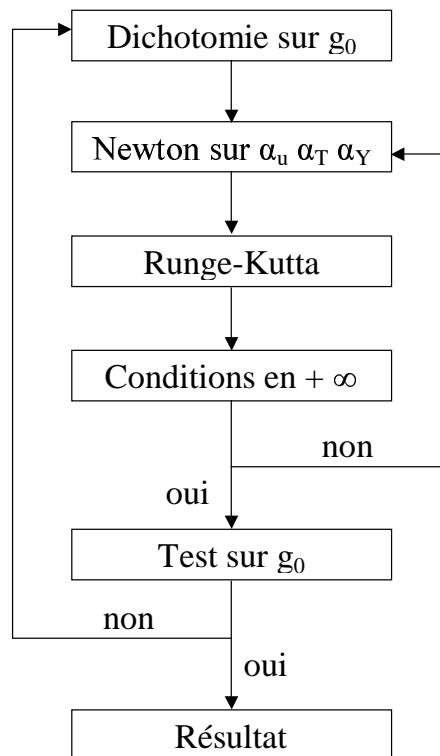


FIG. 10.7 – Repr sentation sch matique de l'algorithme de r solution num rique du syst me d' quation pour la couche de m lange temporelle

10.2.6 R sultats

Tous les r sultats de cette section sont pr sent s pour un nombre de Reynolds de 100 construit sur les grandeurs de r f rence (section 6.1.1) et des coefficients de transport variables (forme (i) du chapitre 9). La couche sup rieure, indic e 1, est toujours l'oxyg ne,

la couche inférieure, indicée 2, peut être l'azote ou l'hydrogène. Les paramètres évoluant librement sont alors les rapports de densité, de température et la différence de vitesse.

Écoulement isotherme

Les effets de Mach convectif et de variation de densité sont étudiés indépendamment du rapport de température. On suppose ici l'écoulement isotherme pour chacune des couches à l'infini : $T_1 = T_2 = 300K$. Les rapports de densité présents lors du mélange binaire des couples N_2/O_2 et H_2/O_2 varient de 1.14 à 15.87. Les écarts de vitesse, présentés en table (10.2), permettent de balayer une large gamme de Mach convectif allant du subsonique au supersonique. On peut ainsi étudier couple par couple l'effet de la vitesse, ou comparer entre les deux couples l'effet du rapport de densité soit pour une même vitesse : $\pm 400m/s$, soit pour un même nombre de Mach convectif : $M_c = 0.485$. Les résultats des calculs sont présentés en figure (10.8).

$\Delta U/2(m/s)$	166	400	1200
H_2/O_2	0.201	0.485	1.456
N_2/O_2	0.485	1.172	3.516

TAB. 10.2 – Nombres de Mach convectif associés aux vitesses des couches de mélange H_2/O_2 et N_2/O_2 pour le cas isotherme $T=300K$

Tout d'abord pour le profil de vitesse longitudinale (fig. 10.8*b*), il est intéressant de noter la quasi non dépendance aux effets de vitesse et de densité. La solution obtenue est proche d'une tangente hyperbolique, représentée en trait continu, mais toutefois un peu plus raide. Par contre, la vitesse transversale (fig. 10.8*c*) est fortement influencée par les paramètres de l'étude. Cette vitesse est négative en $\eta \rightarrow -\infty$ et positive en $\eta \rightarrow +\infty$ traduisant une expansion de la couche de mélange. Lorsque le rapport de densité est faible (N_2/O_2), cette expansion semble quasi-symétrique et la vitesse d'éjection du fluide est d'autant plus grande que le Mach convectif augmente. Pour le rapport de densité supérieur (H_2/O_2), ce profil présente une dissymétrie d'autant plus marquée que le nombre de Mach convectif est grand. Cette perte de symétrie traduit un décalage de la couche de mélange vers le gaz le plus léger, comme observé par [104]. L'évolution de ce décalage, associé à la variation de l'ordonnée telle que $v = 0$, est tracé en figure (10.9) en fonction de la vitesse longitudinale. La couche de mélange semble tendre vers une position asymptotique pour cette ligne de séparation lorsque le Mach convectif augmente.

Le profil de fraction massique d'oxygène (fig. 10.8*e*) est sensible uniquement au rapport de densité. Les courbes du couple N_2/O_2 sont proches d'un profil en tangente hyperbolique, alors que celles pour H_2/O_2 présentent une forte déviation. On note là encore une partie raide du côté du gaz léger et une partie plus arrondie vers le gaz lourd.

Le profil de température (fig. 10.8*d*) est affecté à la fois par le rapport de masse volumique et la différence de vitesse. D'une manière générale, plus le Mach convectif est grand et moins l'approximation de Busemann est correcte. Le rapport de densité intervient à travers le profil de fraction massique qui décale le sommet de la courbe de température.

Enfin, compte tenu de l'équation d'état, le profil de densité (fig. 10.8*a*) est la combinaison des profils de température et fraction massique, il est donc naturel qu'il présente une forte sensibilité à tous les paramètres.

Les importantes variations des rapport de viscosité C , nombre de Prandtl Pr et de Schmidt

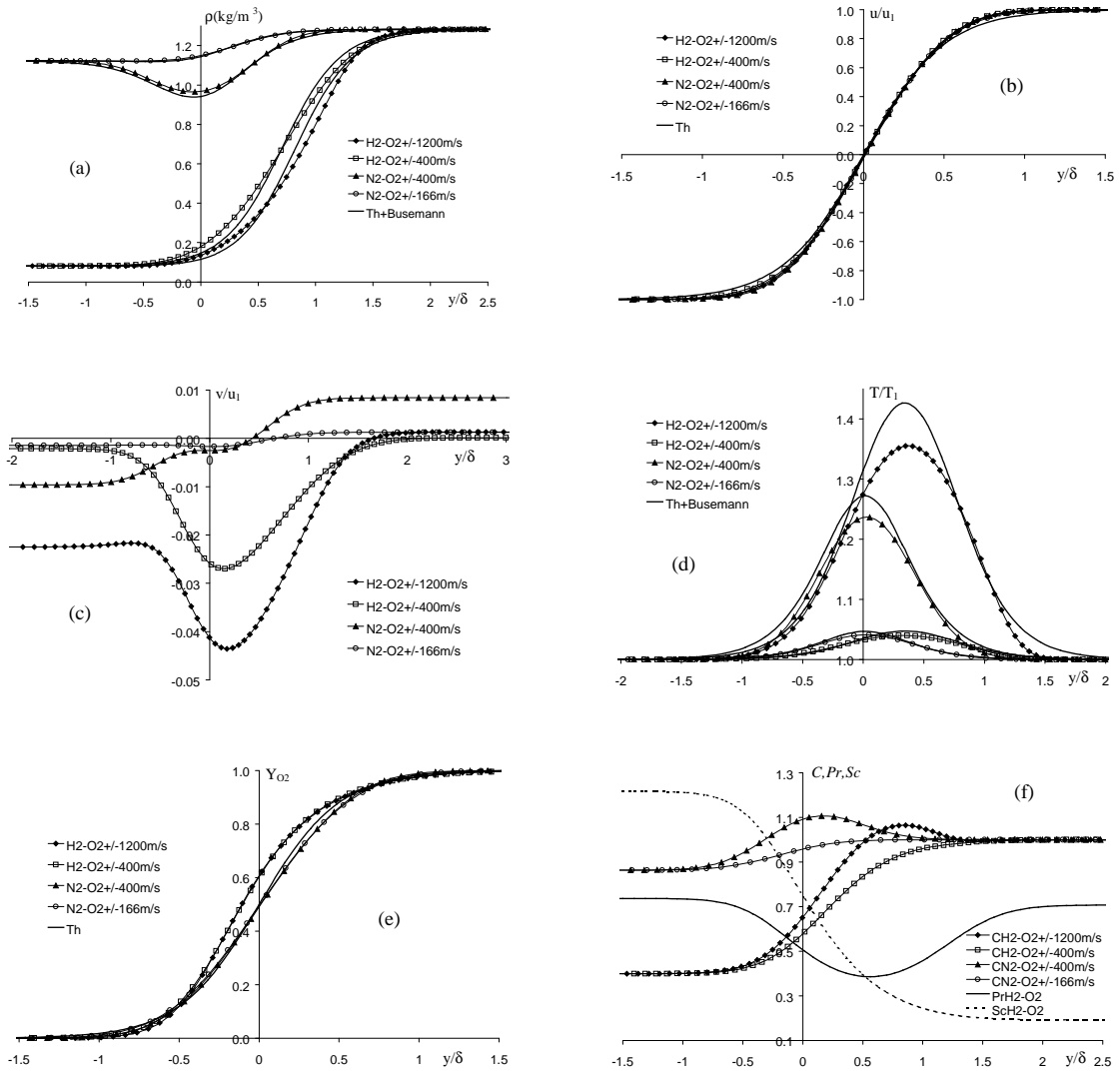


FIG. 10.8 – Solution physique pour les couples H_2/O_2 et N_2/O_2 au même nombre de Mach convectif (0.485), et pour le même écart de vitesse; (a) densité; (b) vitesse longitudinale; (c) vitesse transversale; (d) température; (e) fraction massique d' O_2 ; (f) rapport de viscosité, nombres de Pr et Sc

Sc dans la couche de mélange (fig. 10.8f), justifient l'utilisation de coefficients de transport variables pour l'intégration numérique du système.

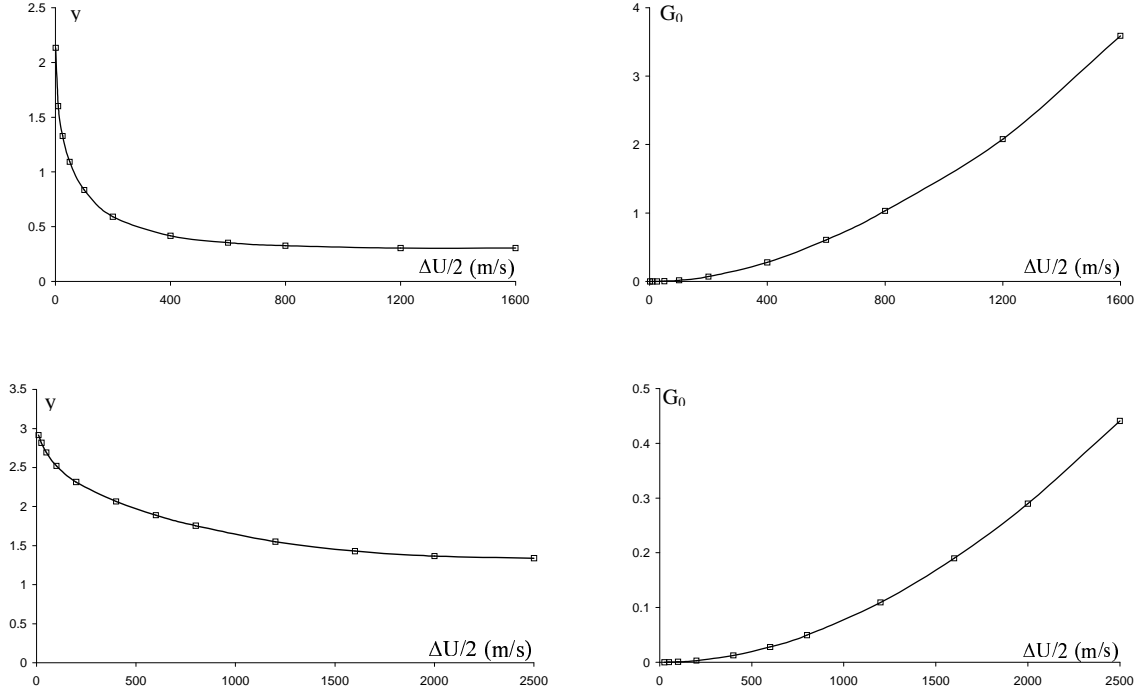


FIG. 10.9 – Ligne de séparation $v = 0$ (gauche) et évolution de g_0 (droite) en fonction de la vitesse longitudinale pour les couples N_2/O_2 (haut) et H_2/O_2 (bas)

Écoulement chauffé

L'effet de température est étudié uniquement pour le couple H_2/O_2 à une vitesse de ± 400 m/s selon les paramètres détaillés en table 10.3. On chauffe ainsi alternativement la couche d'oxygène ou la couche d'hydrogène, ce qui fait évoluer les rapports de densité de 8 à 32 environ.

H_2/O_2	300/600 K	300/300 K	600/300 K
β_T	0.5	1	2
$(\beta_\rho)^{-1}$	7.94	15.87	31.75
M_c	0.450	0.485	0.366

TAB. 10.3 – Effet de température sur le rapport de densité et le nombre de Mach convectif pour le couple H_2/O_2 à ± 400 m/s

Comme le montre la figure (10.10f), l'effet de température est très important sur la forme du rapport de viscosité C et donc sur tout le système car ce paramètre apparaît dans les termes de dérivation supérieure des équations (10.25)–(10.27).

Les profils de vitesse longitudinale (fig. 10.10b) sont toujours très proches mais deviennent maintenant distinguables sur la partie supérieure (O_2).

L'amplitude de la vitesse transversale (fig. 10.10c) est fortement modifiée lorsque l'une ou l'autre des couches est chauffée. Plus le rapport de densité augmente, plus cette amplitude

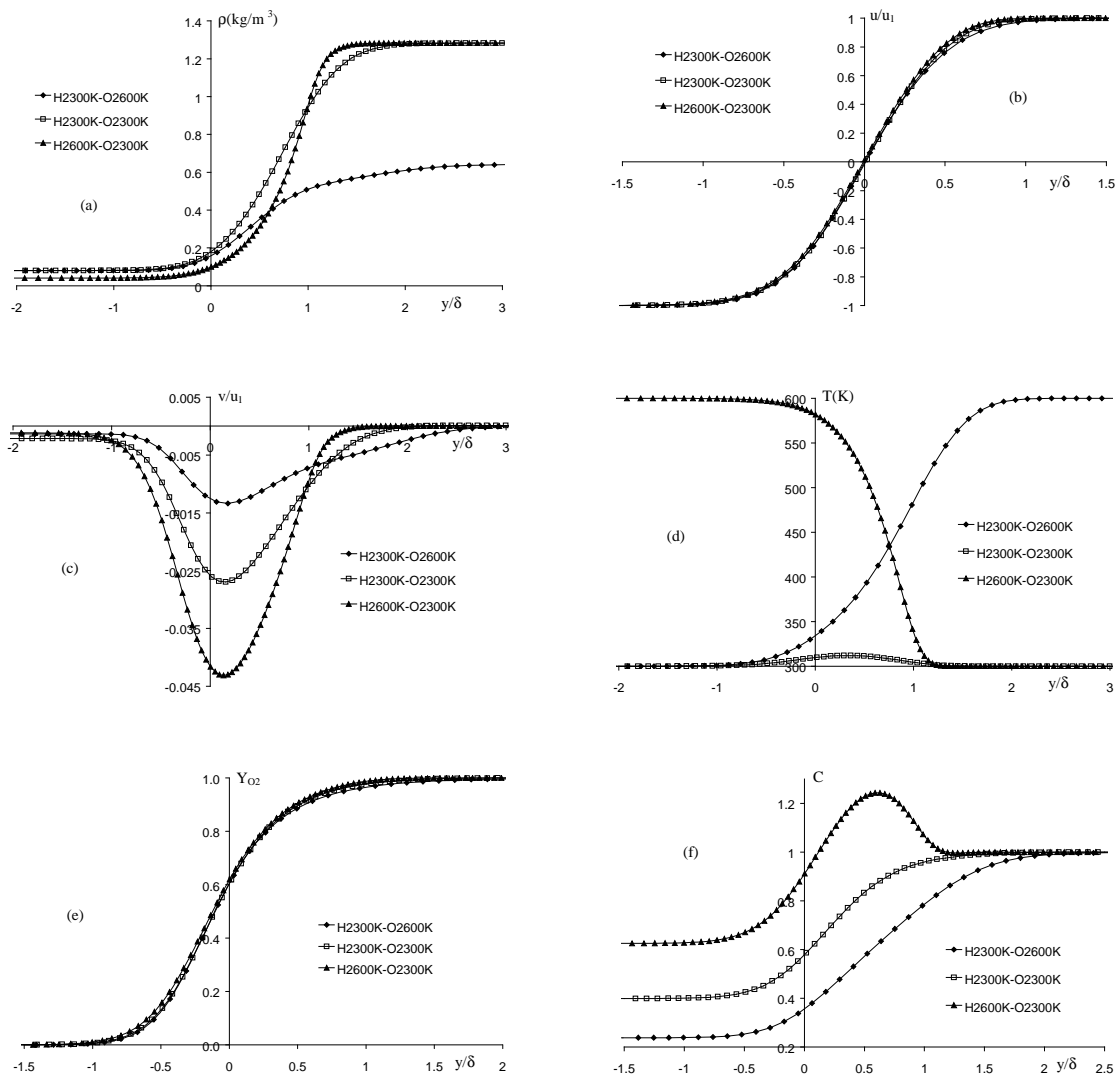


FIG. 10.10 – Solution physique pour le couple H_2/O_2 chauffé à même écart de vitesse ± 400 m/s ; (a) densité ; (b) vitesse longitudinale ; (c) vitesse transversale ; (d) température ; (e) fraction massique d' O_2 ; (f) rapport de viscosité

est importante.

Les profils de température (fig. 10.10d), pour les cas $\beta_T = 1/2$ et $\beta_T = 2$ ne sont pas symétriques. Chauffer l'hydrogène ($\beta_T = 2$), et ainsi augmenter le rapport de densité, rend le problème beaucoup plus raide du fait des paramètres thermodynamiques différents pour les deux gaz.

La fraction massique d'oxygène (fig. 10.10e) ainsi que la vitesse longitudinale sont très peu sensibles au gradient de température.

Synthèse

L'étude paramétrique menée sur la solution numérique du système de la couche de mélange temporelle (10.25)–(10.27), permet de dégager les points suivants :

- Le mélange de deux gaz différents rend le problème d'autant plus raide et dissymétrique que les rapports de masse molaire et de densité sont élevés.
- Le nombre de Mach convectif ne semble pas être un paramètre pertinent pour la comparaison des résultats, dans ce cas *temporel*.
- Le profil de vitesse longitudinale est indépendant des effets de densité.
- La forme du profil de fraction massique d'oxygène dépend uniquement des espèces en présence.
- Le profil de vitesse transversale dépend de tous les paramètres : écart de vitesse (ΔU), rapport de densité (β_ρ), et rapport de température (β_T).
- La forme de la température dépend du rapport de densité, du rapport de température, et de l'écart de vitesse.

On notera également que plus le rapport de densité est élevé et moins l'approximation en tangente hyperbolique est acceptable, au moins sur la forme du profil de fraction massique.

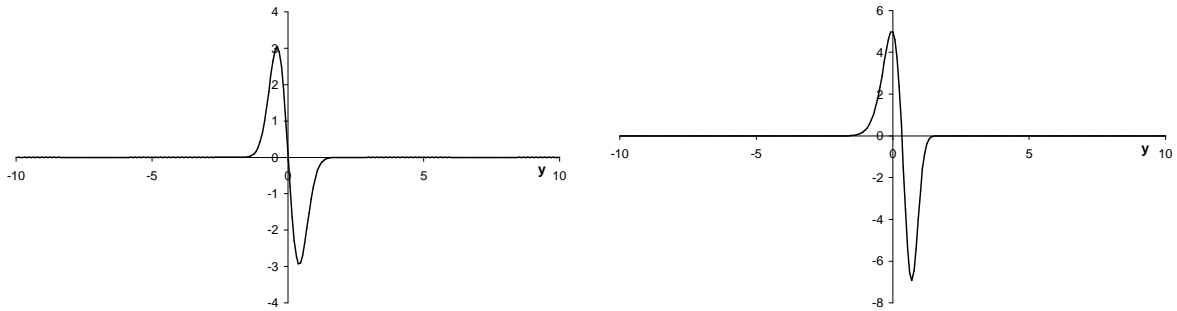


FIG. 10.11 – Vérification du critère de Rayleigh généralisé pour les couples N_2/O_2 (gauche) et H_2/O_2 (droite)

Enfin, on peut s'assurer que ces profils conduisent à un écoulement instable, c'est-à-dire que l'introduction d'une perturbation de faible amplitude a tendance à s'amplifier, en vérifiant la validité du critère du point d'inflexion généralisé. D'après Lees et Lin [53] (référence citée Stoukov [104]) l'écoulement est instable s'il existe un point tel que :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0$$

La figure (10.11) met clairement en évidence l'existence d'un tel point pour les couples N_2/O_2 et H_2/O_2 (ici à $T_0 = 300K$ et $\Delta U = 100m/s$) ce qui assure à la solution en similitude temporelle un comportement cohérent en tant que condition initiale.

10.2.7 Ondes de pression

On s'intéresse maintenant à la réponse acoustique du système Navier-Stokes (1.8)–(1.11) lors de l'utilisation de la solution en similitude temporelle comme condition initiale. Pour cela on reprend les paramètres utilisés pour la formulation en tangente hyperbolique (table 10.1).

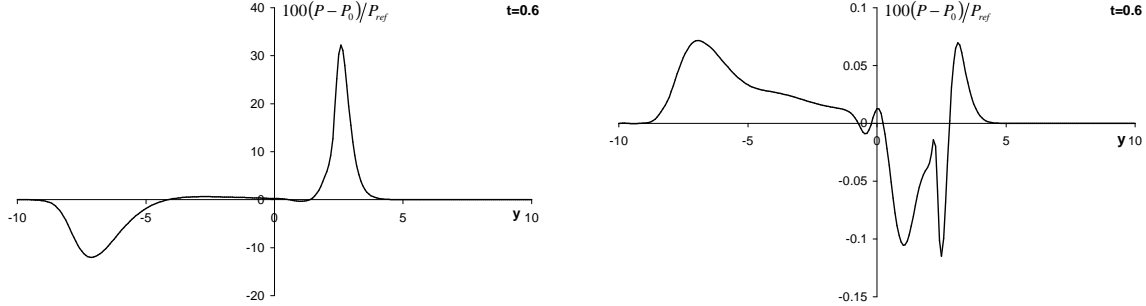


FIG. 10.12 – Amplitude relative des ondes de pression pour le couple H_2/O_2 à $t=0.6$, condition initiale en tangente hyperbolique (gauche) et similitude temporelle (droite)

L'amplitude relative des ondes de pressions générées est représentée en figure (10.12). L'utilisation de la condition en similitude temporelle crée des ondes au comportement plus complexe que pour la tangente hyperbolique, mais permet une réduction en amplitude de l'ordre de 100. Ce cas test valide le concept de l'approche temporelle. L'utilisation de conditions initiales physiquement et mathématiquement cohérentes offre ainsi la possibilité d'effectuer les calculs de couche de mélange binaire à fort rapport de densité avec des schémas à haut pouvoir de résolution sans avoir recours à certains artifices numériques pour stabiliser le calcul (augmentation excessive du nombre de point de maillage, filtrage, domaine éponge, ...).

10.3 Perturbation

De nombreuses études numériques ont été consacrées à la forme de la perturbation utilisée pour déclencher les instabilités de Kevin-Helmholtz [92]. Cette perturbation peut revêtir un caractère aléatoire sous la forme d'un bruit blanc dont vont émerger certaines fréquences privilégiées lors du calcul, ou être contrôlée en se basant sur les résultats de l'analyse de stabilité linéaire.

Dans nos calculs, seules les composantes transversale et d'envergure (pour une couche de mélange 3D) de la vitesse sont perturbées. On a choisi d'imposer un bruit basé sur un nombre fixé de modes à phases aléatoires. Pour la couche de mélange, le bruit est normalisé et confiné par une gaussienne (g) dans la zone de cisaillement :

$$g(a, b, y) = a e^{-b y^2} \quad (10.45)$$

où a et b sont des constantes et y désigne la direction normale à l'écoulement.

Chapitre 11

Stabilité linéaire

Ce chapitre est consacré à l'étude tridimensionnelle des propriétés de stabilité des couches de mélange compressibles bi-espèces pour des rapports de densité variant de 1 à 32 et des nombres de Mach jusqu'à 2. A notre connaissance il n'existe pas de travail équivalent dans le cadre de la stabilité linéaire, les résultats de Kozusko et al [48] étant limités au cas bidimensionnel.

11.1 Généralités

L'analyse de stabilité des écoulements s'avère essentielle pour étudier et comprendre le phénomène de la transition à la turbulence. L'idée de base de la théorie linéaire consiste à examiner la réponse du système à une perturbation de faible amplitude. Si cette perturbation est amplifiée alors, d'après Betchov et Criminale [7], on peut s'attendre à ce que la fréquence de la perturbation soit partie intégrante de la turbulence développée de l'écoulement, mais que son amplitude réelle soit limitée par les effets non linéaires.

Depuis la mise en évidence expérimentale du concept de transition à la turbulence par Reynolds en 1883 [86], de nombreuses études ont tenté de comprendre l'origine du phénomène. Lord Rayleigh posa les bases de la théorie de la stabilité hydrodynamique et établit en 1887 [84] qu'une condition nécessaire d'instabilité est que le profil de vitesse moyenne possède un point d'inflexion. Prandtl, en 1921, montra physiquement que la viscosité pouvait également avoir un effet déstabilisant (référence citée par Vignau [111]).

L'avènement des ordinateurs a permis à Michalke en 1964 [70] de résoudre numériquement l'équation de Rayleigh de la théorie linéaire pour une couche de mélange incompressible en tangente hyperbolique. Il a ainsi pu déterminer une gamme de nombres d'onde instables et l'existence d'une fréquence privilégiée.

L'analyse de l'influence de la contribution visqueuse sur les résultats de la stabilité de la couche de mélange incompressible plane a été menée par Betchov & Szewczyk [6] (fig. 11.1). La viscosité a un effet stabilisant tendant à diminuer la valeur du taux de croissance maximal et la gamme de nombres d'onde instables.

L'étude des écoulements compressibles a été initiée, entre autres, par Lees vers 1947 [54]. Les études numériques de Blumen et al. [8] sur la couche de mélange plane en tangente hyperbolique ont montré que le principal effet de la compressibilité est l'atténuation du facteur d'amplification lorsque le nombre de Mach augmente (fig. 11.2).

Ces auteurs ont également montré que tant que le Mach convectif est inférieur à 1 la vitesse de phase est nulle et la solution est unique. Lorsque le régime supersonique est atteint,

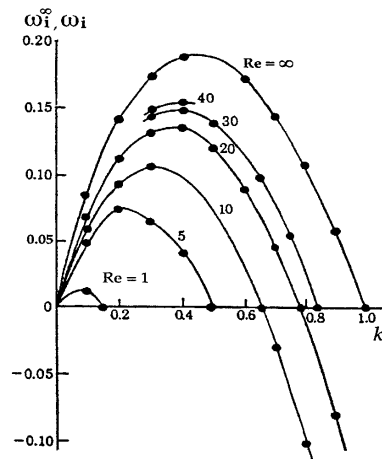


FIG. 11.1 – Analyse de stabilité linéaire en fluide visqueux incompressible. Taux de croissance temporels ω_i issus de Betchov & Szewczyk [6].

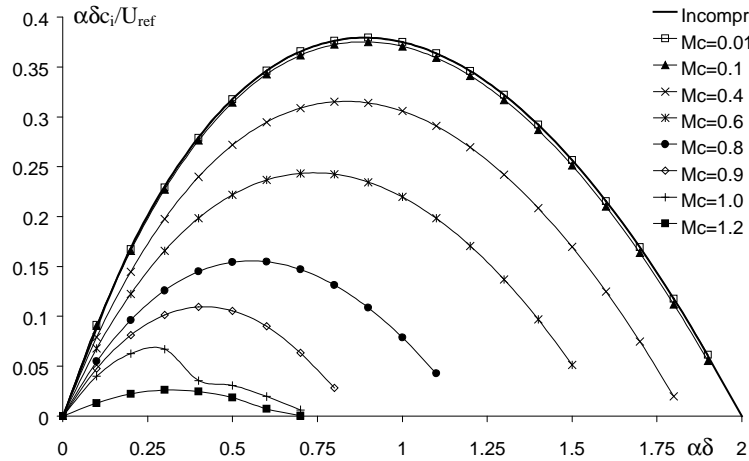


FIG. 11.2 – Facteur d’amplification pour la couche de mélange isotherme ($T = 300K$) plane *air – air* en $Th(2y/\delta)$, analyse non visqueuse.

la solution devient double et les 2 modes ont une vitesse de phase opposée non nulle. En augmentant davantage le Mach convectif, les vitesses de phase augmentent (en restant opposées) mais l’amplification des deux modes diminue pour tendre vers la stabilité neutre (fig. 11.3).

Un autre effet de compressibilité est l’apparition d’une direction de propagation θ privilégiée pour les modes les plus instables, correspondant à une valeur αc_i maximale. En dessous de $M_c \approx 0.6$, les modes les plus instables sont plans ($\theta = 0$). Au-delà, les modes les plus instables s’orientent brusquement selon un angle θ croissant avec M_c jusqu’à devenir pratiquement orthogonaux à la direction de l’écoulement (fig. 11.4). Ce résultat a également été constaté par Sandham et al [93].

Les études récentes de Kozusko et al [48] sur le cas bi-espèce ont montré que le facteur d’amplification et la vitesse de phase sont sensibles au rapport de densité et à la modélisation des coefficients de transport. Leur étude bidimensionnelle est néanmoins limitée à des nombres de Mach convectif faibles [93].

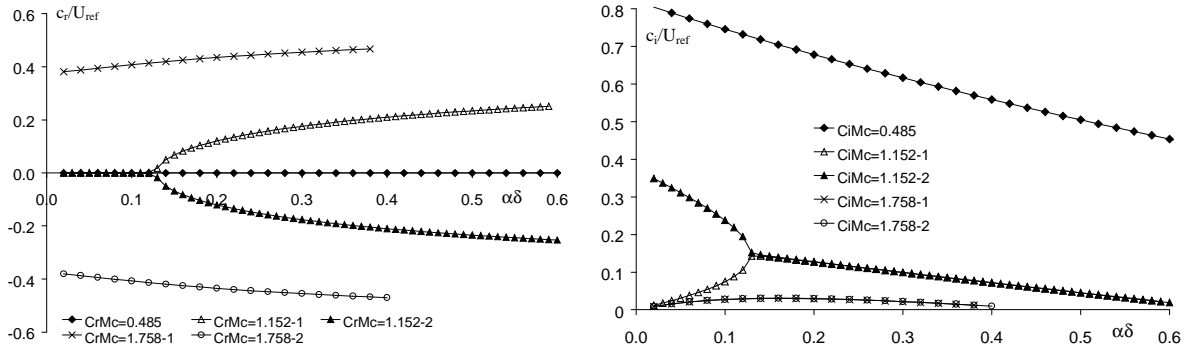


FIG. 11.3 – Partie réelle (gauche) et imaginaire (droite) de la vitesse de phase complexe pour la couche de mélange plane isotherme ($T = 300K$) *air – air* en $Th(2y/\delta)$. La solution devient double en régime supersonique.

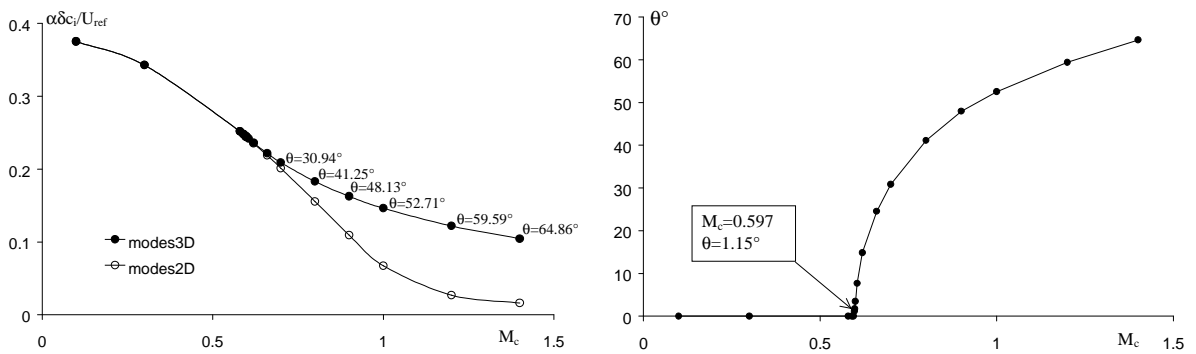


FIG. 11.4 – Facteur d'amplification (gauche) et angle θ (droite) des modes les plus instables pour la couche de mélange isotherme ($T = 300K$) *air – air* en $Th(2y/\delta)$

11.2 Formulation bi-espèces

Dans cette section on détaille les équations résolues pour mener l'analyse temporelle de stabilité linéaire tridimensionnelle d'un mélange bi-espèces compressible. x désigne la direction longitudinale et y la direction transversale, normale au cisaillement.

11.2.1 Équations aux perturbations

Pour plus de simplicité, cette analyse est menée dans le cas non visqueux. On suppose que l'écoulement de base est parallèle, homogène suivant la direction d'envergure z et à pression constante P . Soit, en indiquant s l'écoulement de base :

$$v_s(y, t) = w_s(y, t) = 0 \quad (11.1)$$

A la solution de base on superpose un champ de perturbations de petite amplitude, indicé 0 , de sorte que le champ 3D instantané soit :

$$\rho(x, y, z, t) = \rho_0(x, y, z, t) + \rho_s(y, t) \quad (11.2)$$

$$u(x, y, z, t) = u_0(x, y, z, t) + u_s(y, t) \quad (11.3)$$

$$v(x, y, z, t) = v_0(x, y, z, t) \quad (11.4)$$

$$w(x, y, z, t) = w_0(x, y, z, t) \quad (11.5)$$

$$p(x, y, z, t) = p_0(x, y, z, t) + P \quad (11.6)$$

$$T(x, y, z, t) = T_0(x, y, z, t) + T_s(y, t) \quad (11.7)$$

$$Y(x, y, z, t) = Y_0(x, y, z, t) + Y_s(y, t) \quad (11.8)$$

Le système linéaire pour les perturbations est obtenu en injectant (11.2)–(11.8) dans les équations d'Euler issues de (1.8)–(1.11) une fois les termes quadratiques de perturbation négligés. Soit :

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \rho_s \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial y} + \frac{\partial w_0}{\partial z} \right) + u_s \frac{\partial \rho_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial \rho_s}{\partial y} = 0 \quad (11.9)$$

$$\rho_s \left(\frac{\partial u_0}{\partial t} + u_s \frac{\partial u_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial u_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial p_0}{\partial x} = 0 \quad (11.10)$$

$$\rho_s \left(\frac{\partial v_0}{\partial t} + u_s \frac{\partial v_0}{\partial x} \right) + \frac{\partial p_0}{\partial y} = 0 \quad (11.11)$$

$$\rho_s \left(\frac{\partial w_0}{\partial t} + u_s \frac{\partial w_0}{\partial x} \right) + \frac{\partial p_0}{\partial z} = 0 \quad (11.12)$$

$$\rho_s C_v \left(\frac{\partial T_0}{\partial t} + u_s \frac{\partial T_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial T_s}{\partial y} \right) + P \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial y} + \frac{\partial w_0}{\partial z} \right) = 0 \quad (11.13)$$

$$\frac{\partial Y_0}{\partial t} + u_s \frac{\partial Y_0}{\partial x} + v_0 \frac{\partial Y_s}{\partial y} = 0 \quad (11.14)$$

A ce stade, on décide de modéliser la perturbation par une onde sinusoïdale de nombre d'onde $2\pi/\alpha$ se déplaçant à la vitesse c dans le plan (x, z) suivant une direction faisant l'angle θ avec l'axe x ($\theta \in [-\pi/2; \pi/2]$), et d'amplitude complexe ne dépendant que de y . Soit pour une variable de perturbation Φ_0 :

$$\Phi_0(x, y, z, t) = \widehat{\Phi}_0(y) e^{j\alpha(x \cos \theta + z \sin \theta - ct)} \quad (11.15)$$

En introduisant ces perturbations (11.15) dans les équations linéarisées (11.9)–(11.14), on obtient le système différentiel ordinaire linéaire à résoudre. Il s'agit d'un problème aux valeurs propres pour l'amplitude des perturbations où le symbole ' représente la dérivée suivant y .

$$j\alpha (u_s \cos \theta - c) \widehat{\rho}_0 + \rho'_s \widehat{v}_0 + \rho_s (j\alpha (\widehat{u}_0 \cos \theta + \widehat{w}_0 \sin \theta) + \widehat{v}_0') = 0 \quad (11.16)$$

$$j\alpha \rho_s (u_s \cos \theta - c) \widehat{u}_0 + \rho_s u'_s \widehat{v}_0 + j\alpha \widehat{p}_0 \cos \theta = 0 \quad (11.17)$$

$$j\alpha \rho_s (u_s \cos \theta - c) \widehat{v}_0 + \widehat{p}_0' = 0 \quad (11.18)$$

$$j\alpha \rho_s (u_s \cos \theta - c) \widehat{w}_0 + j\alpha \widehat{p}_0 \sin \theta = 0 \quad (11.19)$$

$$j\alpha (u_s \cos \theta - c) \widehat{T}_0 + T'_s \widehat{v}_0 + (\gamma - 1) T_s (j\alpha (\widehat{u}_0 \cos \theta + \widehat{w}_0 \sin \theta) + \widehat{v}_0') = 0 \quad (11.20)$$

$$j\alpha (u_s \cos \theta - c) \widehat{Y}_0 + \widehat{v}_0 Y'_s = 0 \quad (11.21)$$

L'amplitude de la perturbation de pression se déduit de l'équation d'état :

$$\widehat{p}_0 = (r_2 + (r_1 - r_2) Y_s) (\rho_s \widehat{T}_0 + \widehat{\rho}_0 T_s) + \rho_s T_s (r_1 - r_2) \widehat{Y}_0 \quad (11.22)$$

Soit après quelques calculs :

$$\widehat{p}_0'' - \left(\frac{\rho'_s}{\rho_s} + \frac{2u'_s \cos \theta}{(u_s \cos \theta - c)} \right) \widehat{p}_0' - \alpha^2 \left(1 - \frac{(u_s \cos \theta - c)^2}{a^2} \right) \widehat{p}_0 = 0 \quad (11.23)$$

où $a^2 = \gamma r T_s$ est la vitesse du son dans le mélange aux conditions de la solution de base.

En pratique on résout plutôt ce problème en combinant (11.16)–(11.21) et (11.23) pour se ramener à la détermination de \widehat{p}_0 et \widehat{v}_0 :

$$(u_s \cos \theta - c) \widehat{v}_0' = u'_s \cos \theta \widehat{v}_0 + j\alpha \left(1 - \frac{(u_s \cos \theta - c)^2}{a^2} \right) \frac{\widehat{p}_0}{\rho_s} \quad (11.24)$$

$$\widehat{p}_0' = -j\alpha \rho_s (u_s \cos \theta - c) \widehat{v}_0 \quad (11.25)$$

Les autres termes sont obtenus par les relations :

$$\widehat{u}_0 = -\frac{\rho_s u'_s \widehat{v}_0 + j\alpha \cos \theta \widehat{p}_0}{j\alpha \rho_s (u_s \cos \theta - c)} \quad (11.26)$$

$$\widehat{w}_0 = -\frac{\sin \theta \widehat{p}_0}{\rho_s (u_s \cos \theta - c)} \quad (11.27)$$

$$\widehat{Y}_0 = -\frac{Y'_s \widehat{v}_0}{j\alpha (u_s \cos \theta - c)} \quad (11.28)$$

$$\widehat{\rho}_0 = \frac{\widehat{p}_0}{a^2} - \frac{\rho'_s \widehat{v}_0}{j\alpha (u_s \cos \theta - c)} \quad (11.29)$$

$$\widehat{T}_0 = \frac{(\gamma - 1) T_s \widehat{p}_0}{\gamma} - \frac{T'_s \widehat{v}_0}{j\alpha (u_s \cos \theta - c)} \quad (11.30)$$

11.2.2 Conditions aux limites et procédure de résolution

Le problème numérique est résolu par une méthode de tir nécessitant la connaissance de conditions initiales (problème de Cauchy) à partir des conditions aux limites physiques.

Condition initiale

Les conditions aux limites du problème linéaire sont posées en terme de pression à partir de (11.23). Les gradients de la solution de base s'annulant lorsque $y \rightarrow \pm\infty$, l'équation (11.23) prend la forme asymptotique :

$$\widehat{p}_0'' - \alpha^2 Z \widehat{p}_0 = 0 \quad (11.31)$$

où,

$$Z = 1 - \frac{(U_{\pm\infty} \cos \theta - c)^2}{a_{\pm\infty}^2} \quad (11.32)$$

tient compte des effets de compressibilité.

La solution générale de (11.31),

$$\widehat{p}_0 = A_1 e^{\alpha y \sqrt{Z}} + A_2 e^{-\alpha y \sqrt{Z}} \quad (11.33)$$

combinée avec (11.25) donne :

$$\widehat{v}_0 = \frac{j\sqrt{Z}}{\rho_{s\pm\infty} (U_{\pm\infty} \cos \theta - c)} \left[A_1 e^{\alpha y \sqrt{Z}} - A_2 e^{-\alpha y \sqrt{Z}} \right] \quad (11.34)$$

Les perturbations étant bornées à l'infini, l'une des constantes A_1 ou A_2 doit s'annuler suivant le signe de la partie réelle de $\alpha\sqrt{Z}$.

On considère l'analyse temporelle de la stabilité, α est donc réel positif et c complexe ($c = c_r + jc_i$), avec $c_i \geq 0$ puisque l'on recherche uniquement les modes instables. Soit pour Z :

$$Z = 1 - \frac{(U_{\pm\infty} \cos \theta - c_r)^2 - c_i^2}{a^2} + j \frac{2c_i (U_{\pm\infty} \cos \theta - c_r)}{a^2}$$

Comme pour la couche de mélange mono-espèce incompressible on suppose que $|c_r| \leq |U_{\pm\infty}| \cos \theta$ [94], hypothèse vérifiée numériquement *a posteriori*. Ainsi, à la frontière inférieure ($y \rightarrow -\infty$) où la vitesse de la couche de mélange temporelle $U_{-\infty}$ est négative, $\text{Im}\{Z\} \leq 0$ quel que soit le signe de c_r . En choisissant de retenir numériquement pour \sqrt{Z} la détermination telle que $\arg\{Z^{1/2}\} \in [3\pi/2, 2\pi]$ on a $\text{Re}\{Z^{1/2}\} \geq 0$ et il faut alors annuler la constante A_2 en $y = -\infty$. Inversement, toujours avec la même détermination, A_1 doit être nulle en $y = +\infty$.

Ceci fixe les conditions initiales du problème de Cauchy (11.24)(11.25) qui s'écrivent, en posant $A_1 = 1, A_2 = 0$:

$$\widehat{p}_{0-\infty} = e^{\alpha y_{-\infty} \sqrt{Z}} \quad (11.35)$$

$$\widehat{v}_{0-\infty} = \frac{j\sqrt{Z}}{\rho_{s-\infty} (U_{-\infty} \cos \theta - c)} e^{\alpha y_{-\infty} \sqrt{Z}} \quad (11.36)$$

Résolution

S'étant donné une solution de base, le problème de stabilité revient à déterminer le quadruplet $(\alpha, \theta, c_r, c_i)$ tel que l'intégration numérique de (11.24)(11.25) à partir des conditions (11.35) produise la condition requise, à savoir $A_1 = 0$ en $y_{+\infty}$. Soit, à partir de

(11.33)(11.34) :

$$\begin{aligned} A_{1+\infty} &= \frac{1}{2} \left[\widehat{p}_{0+\infty} - j\rho_{s+\infty} Z_{+\infty}^{-1/2} (U_{+\infty} \cos \theta - c) \widehat{v}_{0+\infty} \right] e^{-\alpha y_{+\infty} Z_{+\infty}^{1/2}} \\ A_{2+\infty} &= \frac{1}{2} \left[\widehat{p}_{0+\infty} + j\rho_{s+\infty} Z_{+\infty}^{-1/2} (U_{+\infty} \cos \theta - c) \widehat{v}_{0+\infty} \right] e^{+\alpha y_{+\infty} Z_{+\infty}^{1/2}} \end{aligned}$$

Annuler A_1 en $y_{+\infty}$ est donc équivalent à imposer :

$$\widehat{p}_{0+\infty} - j\rho_{s+\infty} Z_{+\infty}^{-1/2} (U_{+\infty} \cos \theta - c) \widehat{v}_{0+\infty} = 0 \quad (11.37)$$

L'annulation de cette grandeur complexe requiert l'évaluation numérique de deux éléments du quadruplet inconnu, les deux autres étant fixés. La procédure de résolution consiste alors à intégrer (11.24)(11.25)(11.35) par un schéma Runge-Kutta d'ordre 4, en "tirant" sur (c_r, c_i) jusqu'à vérifier (11.37). A convergence, on obtient les valeurs propres et les fonctions propres du problème de perturbation. Les modes les plus instables sont obtenus par balayage en (α, θ) jusqu'à obtention de la valeur maximale de αc_i .

11.3 Résultats

Les paramètres qui régissent la stabilité d'une perturbation de nombre d'onde α en couche de mélange binaire compressible sont :

- le rapport de densité β_ρ des espèces en présence,
- le nombre de Mach convectif de l'écoulement,
- l'angle θ d'orientation de la direction de propagation de l'onde.

La solution de base utilisée correspond au calcul en similitude temporelle décrit en section 10.2.

11.3.1 Influence du rapport de densité en 2D

On présente d'abord l'influence du rapport de densité sur les perturbations planes ($\theta = 0$) en fonction de M_c , en écoulement isotherme $T = 300K$. Deux couples sont envisagés pour trois nombres de Mach (table 11.1).

Couple	β_ρ	$M_c = 0.485$	$M_c = 1.152$	$M_c = 1.758$
N_2/O_2	1.14	$U = \pm 166m/s$	$U = \pm 393m/s$	$U = \pm 600m/s$
H_2/O_2	15.87	$U = \pm 400m/s$	$U = \pm 949m/s$	$U = \pm 1448m/s$

TAB. 11.1 – Paramètres d'étude de l'effet de densité sur la stabilité linéaire de la couche de mélange isotherme plane.

Cas subsonique : $M_c = 0.485$

Dans le cas subsonique, le problème aux valeurs propres admet une solution unique quel que soit le couple envisagé. Lorsque le rapport de densité est proche de l'unité (N_2/O_2), le bon accord des courbes avec le cas mono-espèce (le gaz air est considéré comme mono-espèce) valide le code de stabilité linéaire (fig. 11.5).

Le passage au cas bi-espèces induit une légère diminution de la valeur du nombre d'onde d'amplification maximale. L'accroissement du rapport de densité des espèces mélangées

conduit à une réduction du facteur d'amplification accompagnée par une augmentation de la vitesse de phase. Ainsi, plus les espèces en présence ont une masse molaire éloignée et plus il est difficile de déstabiliser la couche de mélange. Dans le cadre d'une simulation numérique directe, pour une même amplitude de la perturbation initiale, il faudra donc plus de temps à la couche de mélange H_2/O_2 pour transitionner vers la turbulence que dans le cas N_2/O_2 et les structures cohérentes "voyageront" dans la boîte de calcul.

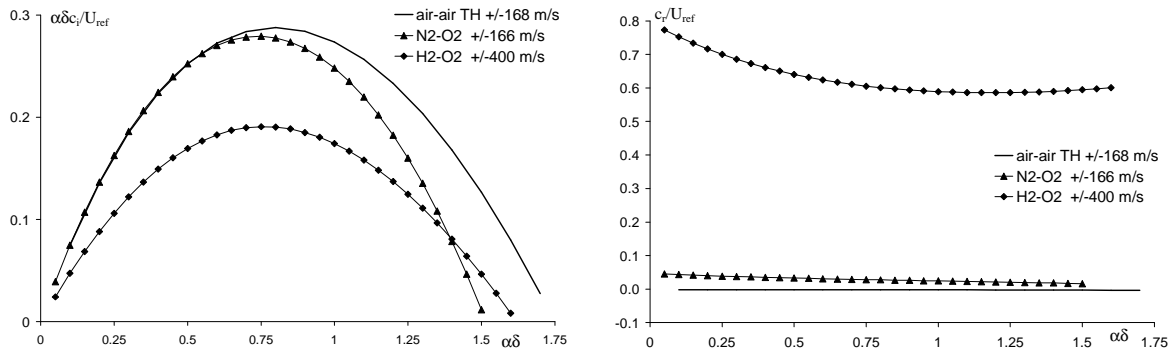


FIG. 11.5 – Facteur d'amplification (gauche) et vitesse de phase (droite) en fonction du rapport de densité à $M_c = 0.485$

Cas sonique : $M_c = 1.152$

Dans le cas légèrement supersonique, l'analyse met en avant l'apparition d'un second mode, on perd l'unicité de la solution (fig. 11.6).

Pour le mélange mono-espèce, comme rappelé en section 11.1, en dessous d'un nombre d'onde critique, situé légèrement au-dessus de 0.1 en notation adimensionnelle, les deux modes ont une vitesse de phase identiquement nulle mais un facteur d'amplification différent : le second mode est nettement moins amplifié que le premier. Au-delà de ce nombre d'onde critique les facteurs d'amplification sont identiques mais maintenant les vitesses de phase sont opposées, les modes voyagent en sens inverse.

En bi-espèce le système est dissymétrisé. Les vitesses de phase ne sont plus opposées et le facteur d'amplification est nettement plus faible que dans le cas subsonique. Il n'y a plus non plus de nombre d'onde critique à proprement parler, les deux modes ont des comportements d'autant plus distincts que le rapport de densité est grand, l'un étant largement plus amplifié que l'autre.

Cas supersonique : $M_c = 1.758$

En augmentant encore le nombre de Mach, $M_c = 1.758$ (fig. 11.7), le mode critique du cas mono-espèce disparaît, les deux modes sont amplifiés de manière identique mais possèdent des vitesses de phase opposées.

On retrouve un comportement similaire pour le mélange bi-espèces, les courbes d'amplification se rapprochent mais les vitesses de phase sont d'autant moins symétriques que le rapport de densité est élevé. Le facteur d'amplification devient de plus en plus faible, si bien qu'il devient très difficile de déstabiliser une couche de mélange dans ces conditions, d'autant plus que le rapport de densité est élevé.

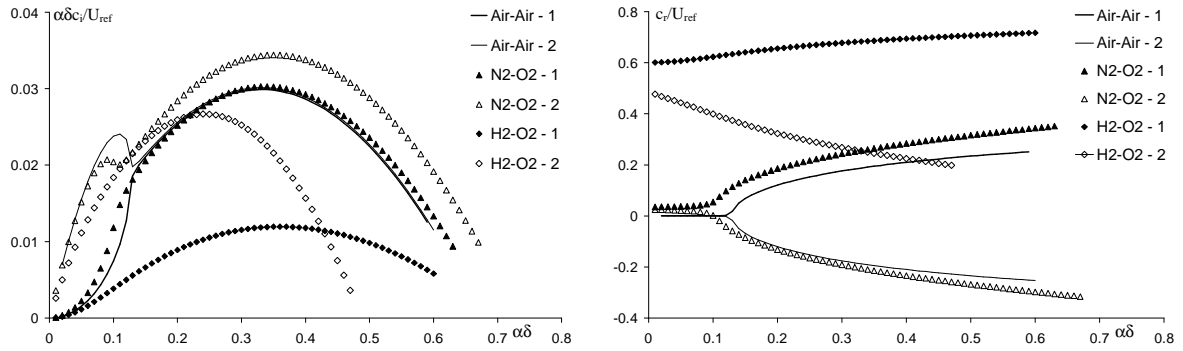


FIG. 11.6 – Facteur d’amplification (gauche) et vitesse de phase (droite) en fonction du rapport de densité à $Mc = 1.152$. Les solutions sont doubles

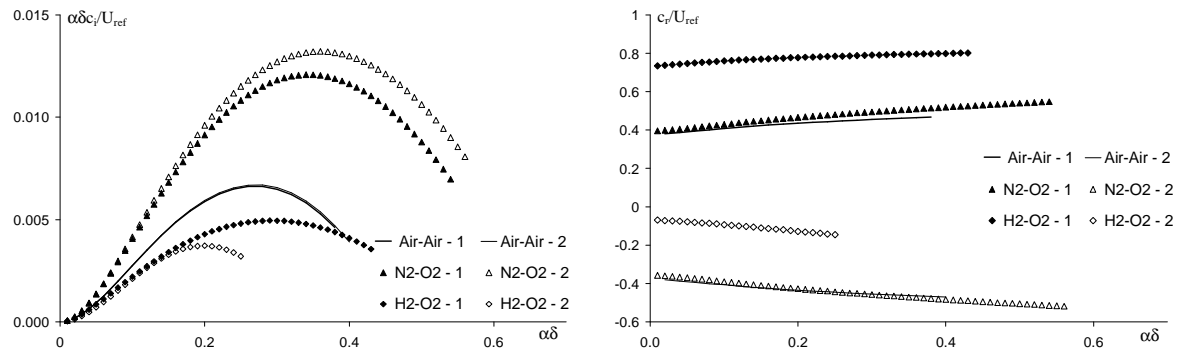


FIG. 11.7 – Facteur d’amplification (gauche) et vitesse de phase (droite) en fonction du rapport de densité à $Mc = 1.758$. Les solutions sont doubles

11.3.2 Détail des solutions doubles

En section 11.1 on a rappelé que les solutions devenaient doubles à partir de $Mc = 1$ pour la couche de mélange mono-espèce (fig. 11.3). Nous allons examiner ici plus en détail ce qu’il en est pour les couches de mélange binaires planes ($\theta = 0$).

Couple N_2/O_2

La figure (11.8) montre le diagramme de stabilité globale pour le couple N_2/O_2 . On constate numériquement que la solution devient double entre $Mc = 0.9$ et $Mc = 1.0$, puis que les vitesses d’amplification c_i se confondent à nouveau vers $Mc = 1.8$.

En zoomant sur la plage de dédoublement (fig. 11.9), on voit apparaître le second mode à $Mc \approx 0.92$. Ce mode émerge d’un état stable et est difficile à ”capturer” numériquement du fait de la faible valeur de c_i .

Lorsque Mc augmente, les deux solutions se différencient. Les vitesses de phase c_r deviennent opposées autour d’une valeur moyenne non nulle. Vers $Mc = 1.3$, les valeurs de c_i se rejoignent et finissent par se confondre pour $Mc \approx 1.5$ (fig. 11.10).

Couple H_2/O_2

A fort rapport de densité, le cas H_2/O_2 montre l’apparition de seconds modes très faiblement amplifiés (fig. 11.11). Les vitesses de phase c_r des modes ne sont plus symétriques autour de leurs valeurs moyennes, très élevées par ailleurs (fig. 11.12).

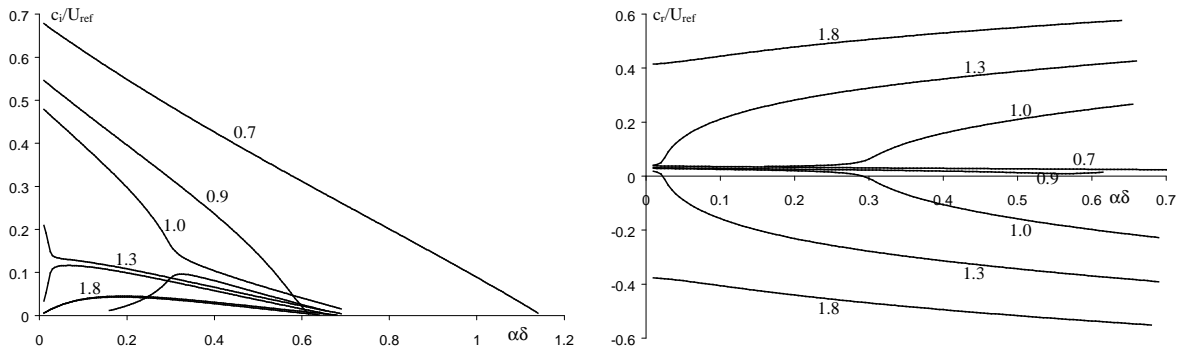


FIG. 11.8 – Vitesse d’amplification (gauche) et de phase (droite) pour la couche de mélange N_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ - $\theta = 0$

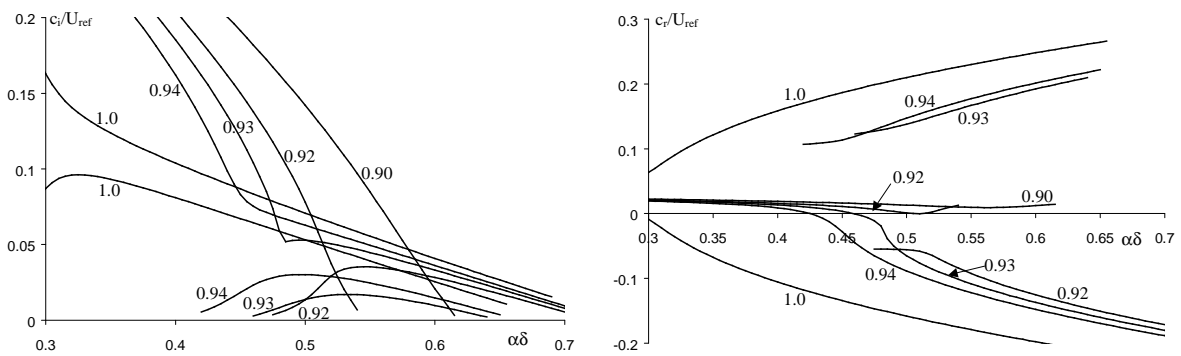


FIG. 11.9 – Vitesse d’amplification (gauche) et de phase (droite) pour la couche de mélange N_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ - $\theta = 0$. Zoom sur la plage $M_c = 0.9 - 1.0$

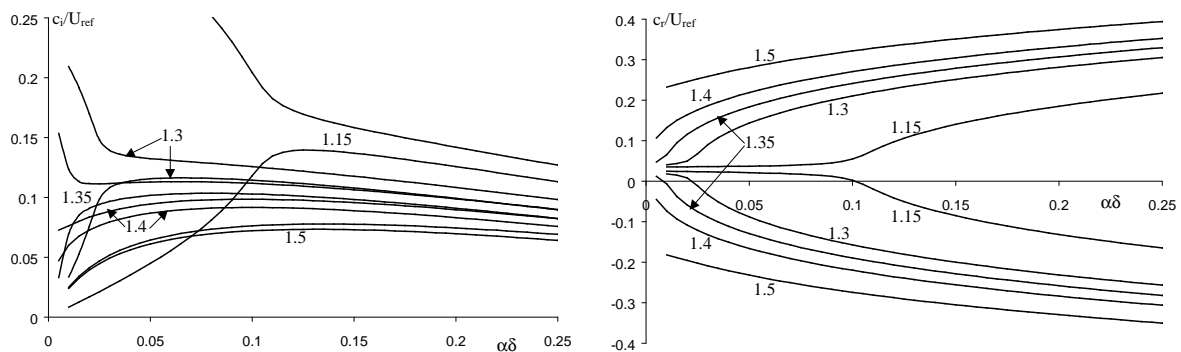


FIG. 11.10 – Vitesse d’amplification (gauche) et de phase (droite) pour la couche de mélange N_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ - $\theta = 0$. Zoom sur la plage $M_c = 1.15 - 1.5$

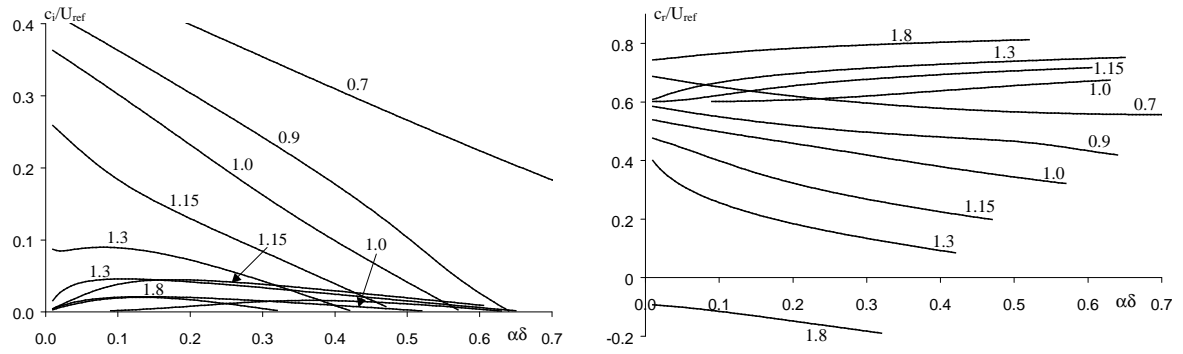


FIG. 11.11 – Vitesse d’amplification (gauche) et de phase (droite) pour la couche de mélange H_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ - $\theta = 0$

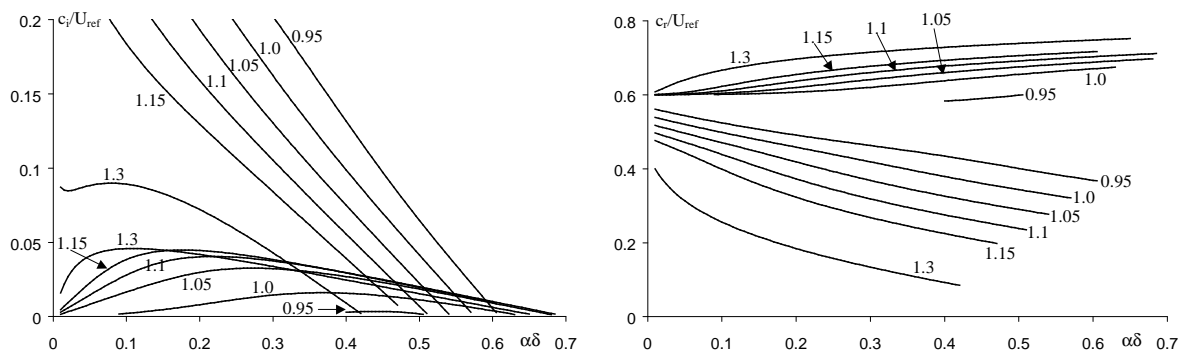


FIG. 11.12 – Vitesse d’amplification (gauche) et de phase (droite) pour la couche de mélange H_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ - $\theta = 0$. Zoom sur la plage $M_c = 0.95 - 1.3$

11.3.3 Apparition de modes obliques

Pour les deux couples de fluides envisagés, on étudie maintenant l'évolution de l'orientation des modes les plus instables en fonction du nombre de Mach convectif. Comme pour la couche de mélange mono-espèce, les modes les plus instables sont plans pour $M_c \lesssim 0.6$ et s'orientent de façon privilégiée au-delà. L'effet de densité est faible, la solution bifurque de manière identique au cas mono-espèce (fig. 11.13).

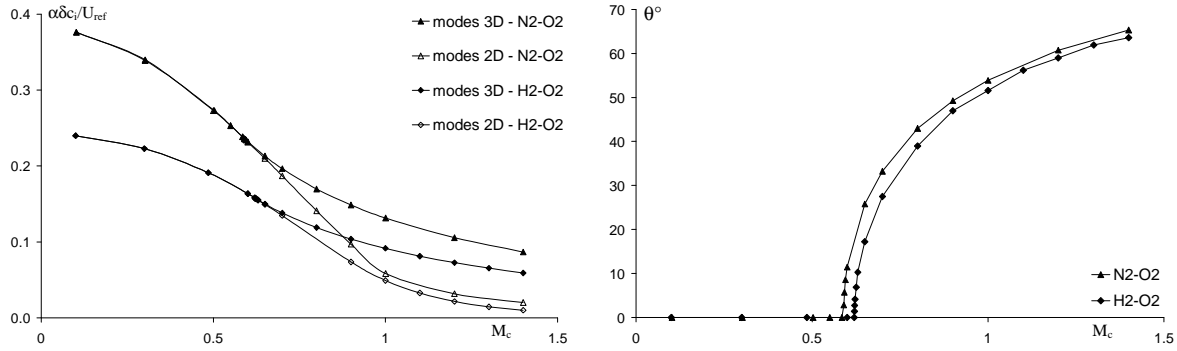


FIG. 11.13 – Facteur d’amplification (gauche) et angle θ (droite) des modes les plus instables pour la couche de mélange binaire isotherme à $T = 300K$

Une façon plus parlante de représenter les effets tridimensionnels associés à la compressibilité est de tracer le facteur d’amplification maximum obtenu à un angle θ donné pour différentes valeurs du nombre de Mach convectif. Pour chaque valeur de M_c , le maximum observé définit la direction de propagation optimale des perturbations pour déstabiliser la couche de mélange. Par exemple, pour le couple H_2/O_2 (fig. 11.14), la direction optimale à $M_c = 1.1$ est $\theta \approx 57^\circ$. On constate également une fois de plus la stabilisation de la couche de mélange avec l’augmentation des effets de compressibilité.

11.4 Comparaison à la SND

On se propose ici de vérifier les performances et les limites de validité de la théorie linéaire bi-espèce non visqueuse, en comparant les taux de croissance et les vitesses de phase prédits à ceux relevés dans une simulation numérique directe, comme l’a fait Amram [1] dans le cas mono-espèce pour un profil de base en tangente hyperbolique.

11.4.1 Méthodologie

Les calculs de simulation numérique directe sont effectués grâce au code COMPACT décrit au chapitre 6 (on notera que nous n’avons pas utilisé de termes anti-diffusifs proposés par Huerre [44] dont le rôle est de compenser l’effet de la diffusion visqueuse). Les conditions initiales sont construites à partir des solutions en similitude temporelle (section 10.2) auxquelles on superpose les fonctions propres des modes les plus instables, telles que l’amplitude \widehat{u}_0 vaille 5% de U . Pour des raisons de coût de calcul, on se limite au cas plan ($\theta = 0$) et donc à des valeurs de M_c inférieures à 0.6.

Quatre cas tests sont envisagés dont les paramètres et propriétés de stabilité sont rassemblés en table 11.2.

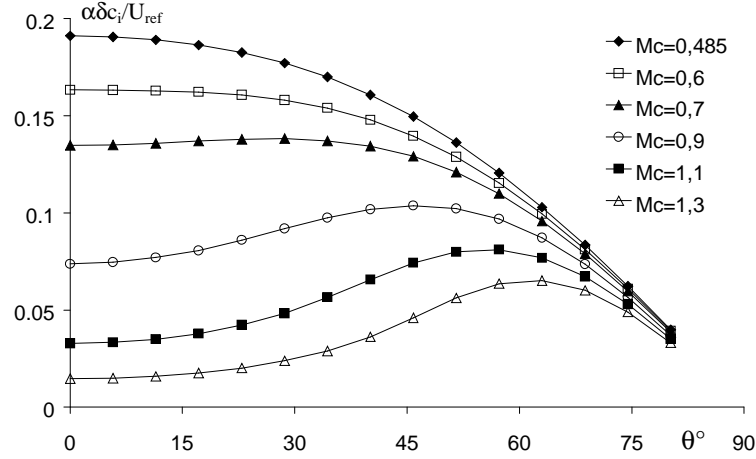


FIG. 11.14 – Facteur d’amplification pour la couche de mélange H_2/O_2 isotherme à $T = 300K$ en fonction de θ pour différentes valeurs de M_c

Couple	T1/T2 (K)	U (m/s)	$(\beta_\rho)^{-1}$	M_c	αL_{ref}	c_r/U_{ref}	$\alpha c_i t_{ref}$
N_2/O_2	300/300	± 166	1.143	0.485	0.739	0.028	0.279
H_2/O_2	300/600	± 400	7.937	0.450	0.785	0.479	0.237
H_2/O_2	300/300	± 400	15.87	0.485	0.761	0.605	0.191
H_2/O_2	600/300	± 400	31.75	0.366	0.787	0.718	0.159

TAB. 11.2 – Rapports de densité et propriétés de stabilité (théorie linéaire)

La taille du domaine de calcul correspond à la longueur d’onde de la perturbation la plus instable, de sorte qu’une seule structure apparaisse à partir de l’instabilité de Kelvin-Helmholtz initiale.

S’il existe une phase de croissance linéaire au cours de la simulation alors les perturbations suivent une loi de type exponentiel puisque selon (11.15) on a :

$$\frac{\partial u'}{\partial t} = \alpha c_i u'$$

soit

$$\ln u' = \alpha c_i t + cste \quad (11.38)$$

Ce taux de croissance est mesuré en terme d’énergie cinétique fluctuante. Chaque grandeur ϕ issue de la SND est décomposée en sa valeur moyenne :

$$\bar{\phi}(y, t) = \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} \phi(x, y, t) dx$$

et sa composante fluctuante :

$$\phi'(x, y, t) = \phi(x, y, t) - \bar{\phi}(y, t)$$

L’énergie cinétique fluctuante est donc :

$$k(t) = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} (u'^2(x, y, t) + v'^2(x, y, t)) dx dy$$

D'après (11.38) la courbe $\frac{1}{2} \ln(k(t))$ doit théoriquement être linéaire en début de simulation, de pente αc_i .

11.4.2 Influence du nombre de Reynolds

La théorie étant non-visqueuse, on étudie dans un premier temps l'influence du nombre de Reynolds de la simulation dans les cas isothermes N_2/O_2 et H_2/O_2 à $M_c = 0.485$. Pour chaque couple, trois valeurs de Re on été testées : 100, 400 et 1000.

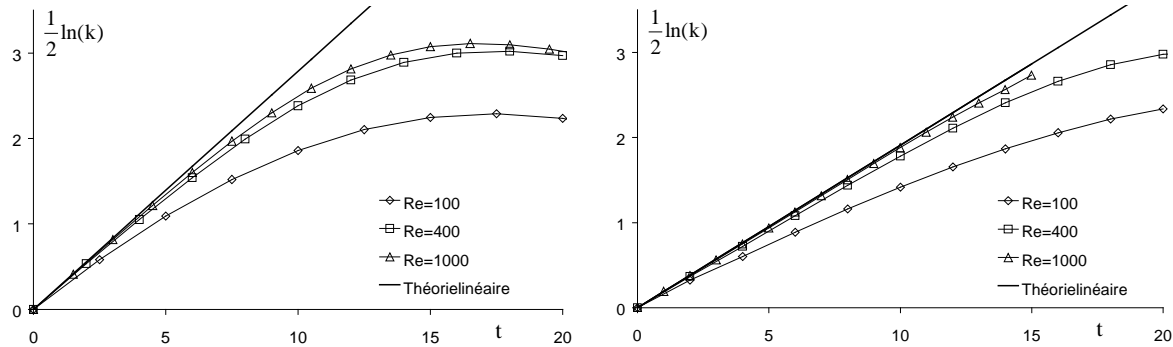


FIG. 11.15 – Taux de croissance temporelle de l'énergie cinétique fluctuante pour les couples N_2/O_2 (gauche) et H_2/O_2 (droite) dans le cas isotherme $T = 300K$, $M_c = 0.485$

La figure (11.15) montre clairement que la théorie non visqueuse n'est pas valable pour un nombre de Reynolds inférieur à 400, au niveau de perturbation choisi. En effet, la théorie étant linéaire, plus le facteur d'amplification est faible et plus l'amplitude des perturbations reste petite et la simulation suit alors plus longtemps la courbe théorique. On notera que les résultats de la simulation directe restent toujours en dessous des valeurs prédites, les effets visqueux ayant un effet stabilisant.

11.4.3 Effets thermiques

Les effets thermiques sont étudiés seulement pour le couple H_2/O_2 à $Re = 400$.

Le fait de diminuer le rapport de densité en chauffant l'oxygène ($(\beta_\rho)^{-1} = 7.937$) réduit l'intervalle de temps où la simulation suit la théorie linéaire (fig. 11.16). L'effet inverse est obtenu en chauffant l'hydrogène ($(\beta_\rho)^{-1} = 31.75$), comme mentionné par Amram [1] dans le cas mono-espèce.

11.4.4 Vitesse de phase

Les figures (11.17) et (11.18) présentent l'évolution temporelle du champ de fraction massique d'oxygène des quatre cas considérés pour un nombre de Reynolds de 400. Le taux de croissance de la couche de mélange et la vitesse de phase des tourbillons issus des perturbations initiales sont clairement mis en évidence.

Plus le rapport de densité est élevé, à la fois par les espèces en présence et par les effets thermiques, et plus la vitesse de phase des structures est importante : les structures "voyagent" dans la boîte de calcul. L'estimation graphique de cette vitesse (à partir du coeur des tourbillons) coïncide exactement avec les valeurs prédites par la théorie linéaire (table 11.2). Cette propriété est indépendante des effets visqueux.

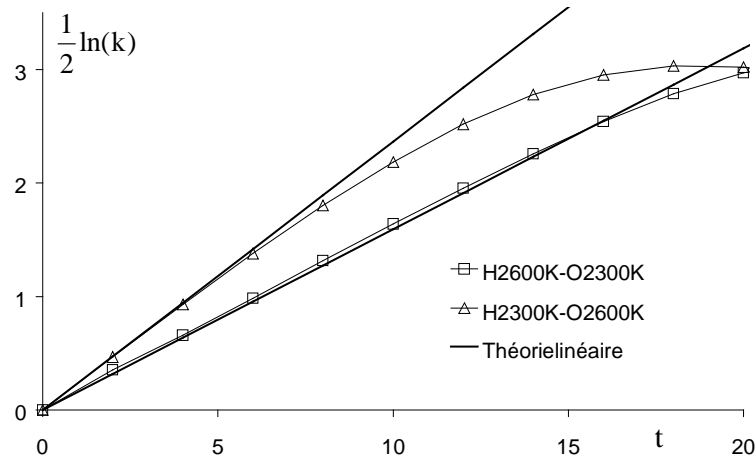


FIG. 11.16 – Taux de croissance temporelle de l'énergie cinétique fluctuante pour le couple H_2/O_2 chauffé à $Re=400$.

11.5 Synthèse

Dans ce chapitre, la théorie de la stabilité linéaire a été appliquée au mélange de deux fluides. Comparativement au cas mono-espèce, le mélange bi-espèce brise la symétrie du système, même en approche temporelle.

Les résultats du cas N_2/O_2 sont proches de ceux obtenus en mono-espèce. L'accroissement du rapport de densité (H_2/O_2) conduit à une réduction du facteur d'amplification, associée à l'augmentation de la vitesse de phase. Les résultats des simulations numériques directes de la couche de mélange plane ont permis de retrouver ce comportement pour $Re > 400$.

L'augmentation du nombre de Mach conduit à l'apparition d'une orientation privilégiée des modes les plus instables (du 2D vers le 3D) à partir de $M_c = 0.6$, quel que soit le rapport de densité considéré. L'étude fine de la gamme supersonique a montré l'apparition de nouveaux modes jusqu'à $M_c \approx 2$.

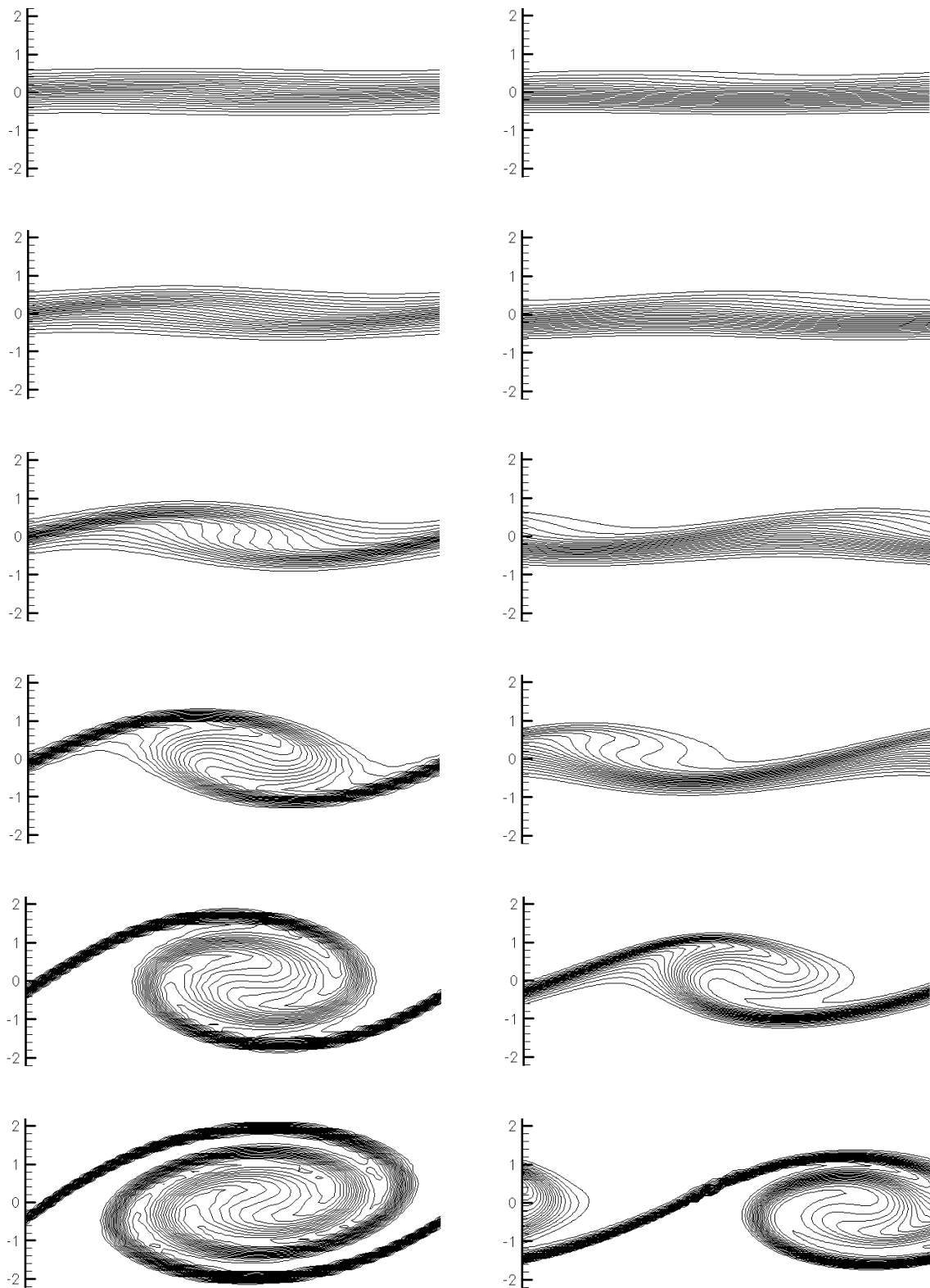


FIG. 11.17 – Fraction massique d’oxygène. Gauche : $N_2/O_2 - 300K, \pm 166m/s$, droite : $H_2/O_2 - 300K, \pm 400m/s$, aux temps $t = 0, 4, 8, 12, 16, 20$ (de haut en bas)

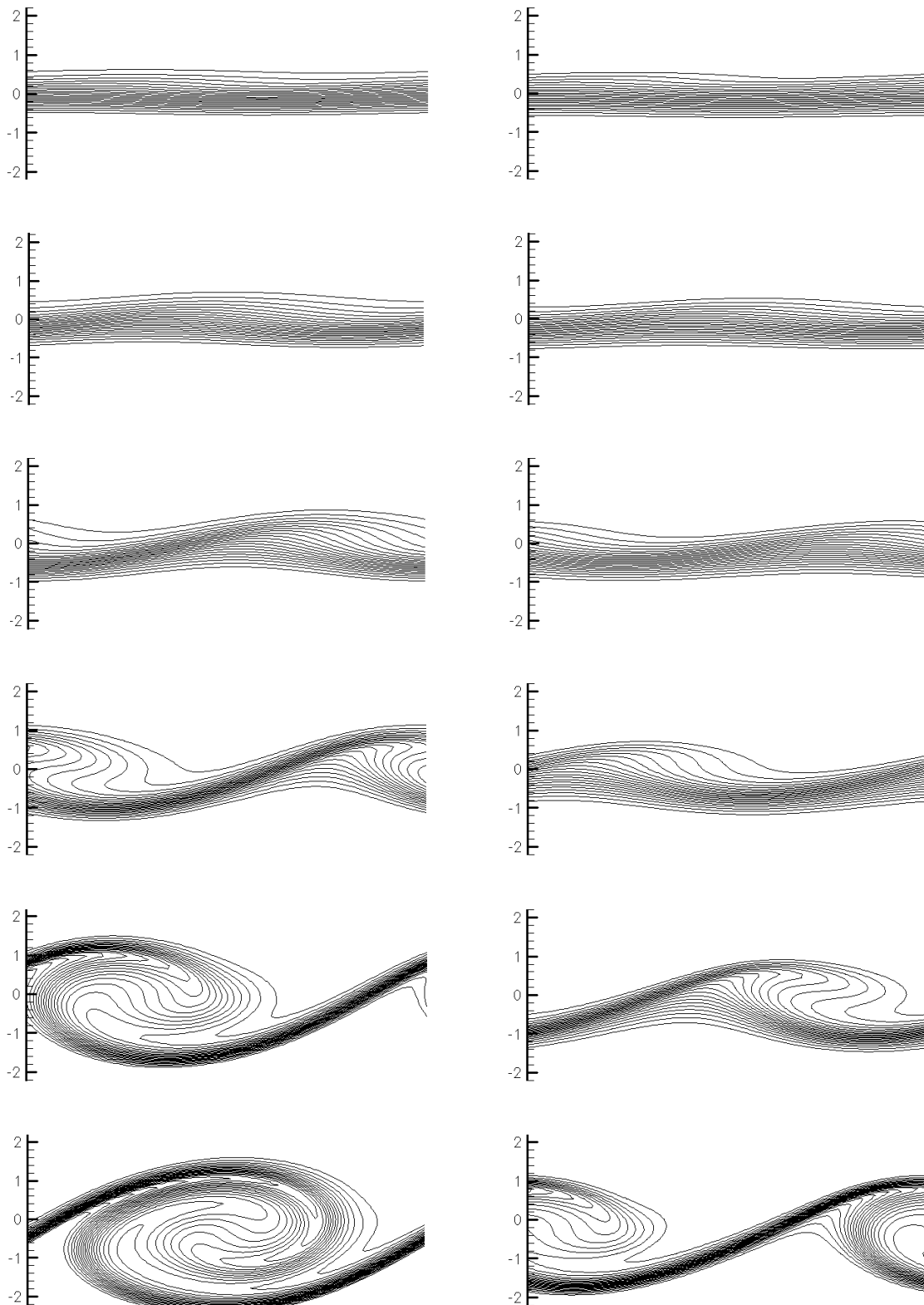


FIG. 11.18 – Fraction massique d'oxygène. Gauche : $H_2 - 300K/O_2 - 600K, \pm 400m/s$, droite : $H_2 - 600K/O_2 - 300K, \pm 400m/s$, aux temps $t = 0, 4, 8, 12, 16, 20$ (de haut en bas)

Chapitre 12

Tests a priori

Ce chapitre détaille les tests effectués pour obtenir les ordres de grandeur des termes sous-maille (3.20)–(3.22), (3.24)–(3.33), (3.35)(3.36), par filtrage explicite des champs instantanés issus de simulations numériques directes (cf section 4.1). Les seuls résultats disponibles sur cette approche sont ceux de Vreman [112] pour le cas compressible mono-espèce isotherme rappelés en section 4.2.2.

12.1 Méthodologie

12.1.1 Simulation numérique directe

Les calculs sont effectués grâce au code COMPACT sur la couche de mélange compressible bi-espèces en développement temporel (fig. 12.1). Les directions longitudinale (x) et transversale (y) sont périodiques alors qu’une condition de frontière libre est imposée pour la direction normale à l’écoulement (z).

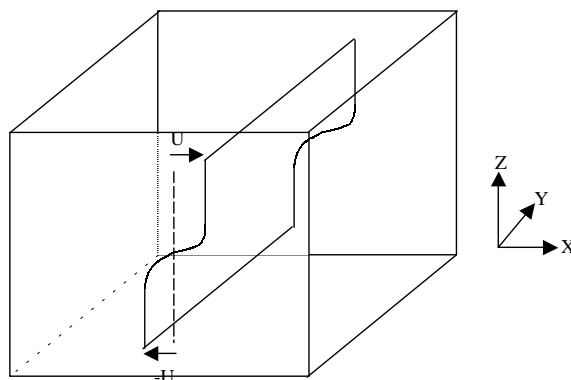


FIG. 12.1 – Représentation schématique de la couche de mélange temporelle 3D

On considère deux couples de fluide : N_2/O_2 et H_2/O_2 . Le premier, de rapport de masse molaire quasi-unitaire, permet une comparaison aux résultats de Vreman, le second introduit de fortes variations de densité et des paramètres thermodynamiques des fluides.

Les conditions initiales sont basées sur la similitude temporelle (section 10.2). Le bruit initial est obtenu à partir de la méthode détaillée en section 10.3 par activation de 10 modes dans chaque direction d’espace (les résultats de l’analyse de stabilité linéaire n’ont pas été utilisés ici).

Enfin, pour plus de simplicité, les coefficients de transport utilisés pour les SND sont supposés constants (approche (iv) détaillée au chapitre 9).

12.1.2 Statistiques

Un traitement statistique est nécessaire afin d'extraire les informations d'intérêt parmi l'importante masse de données issues des SND.

Filtrage

Le filtrage retenu pour le calcul *a priori* des termes sous-maillages est basé sur le filtre porte discret détaillé en sections 2.2.1 et 2.2.2 avec $K = 4$.

Échelles de la turbulence

Malgré la nature anisotrope de l'écoulement, les échelles de la turbulence sont évaluées à partir de relations issues de la théorie de la turbulence homogène et isotrope incompressible étendues au compressible [14].

Ici, l'opérateur $\tilde{\cdot}$ désigne la moyenne de Favre construite comme :

$$\tilde{\phi}(z, t) = \frac{\langle \rho \phi \rangle_{xy}}{\langle \rho \rangle_{xy}}$$

où la moyenne d'ensemble $\langle \cdot \rangle_{xy}$ est approchée par la moyenne spatiale sur les plans homogènes :

$$\langle \phi \rangle_{xy}(z, t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i_1=1}^{N_x} \sum_{i_2=1}^{N_y} \phi(x_{i_1}, y_{i_2}, z, t)$$

La fluctuation de vitesse est obtenue par :

$$u_i''(x, y, z, t) = u_i(x, y, z, t) - \tilde{u}_i(z, t)$$

L'énergie cinétique turbulente pondérée par la masse s'écrit alors :

$$\tilde{k}(z, t) = \frac{1}{2} \frac{\langle \rho u_i'' u_i'' \rangle_{xy}}{\langle \rho \rangle_{xy}}$$

et son taux de dissipation comme :

$$\tilde{\epsilon}(z, t) = \frac{\langle \rho \nu (u_{i,j}'' + u_{j,i}'') u_{j,i}'' \rangle_{xy}}{\langle \rho \rangle_{xy}}$$

La micro-échelle de Taylor est définie à partir de la relation :

$$\lambda(z, t) = \sqrt{\frac{10 \cdot \tilde{\nu} \cdot \tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}}$$

et le nombre de Reynolds construit sur les échelles de Taylor s'exprime alors comme :

$$Re_\lambda(z, t) = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}} \tilde{k} \lambda}{\tilde{\nu}} \quad (12.1)$$

Épaisseurs statistiques

Les épaisseurs statistiques (vorticité et quantité de mouvement compressible) sont obtenues par les formules données en section 8.3.

Intensité des termes sous-maille

L'intensité des termes sous-maille est calculée à partir de la moyenne quadratique :

$$I(t) = \sqrt{\frac{1}{Nz} \sum_{k=1}^{Nz} \langle \phi \rangle_{xy}^2(z_k, t)} \quad (12.2)$$

A titre d'illustration on détaille la procédure complète sur le calcul de A_{1i} , où on rappelle :

$$A_{1i} = -\tau_{ij,j} = (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \overline{\rho u_i u_j})_{,j} \quad (12.3)$$

avec $\bar{\cdot}$ filtrage porte et $\tilde{\cdot} = \frac{\bar{\cdot}}{\rho}$ filtrage de Favre.

1. A t fixé, on calcule en chaque point : $\{\bar{\rho}; \tilde{u}_i; \overline{\rho u_i u_j}\}(x, y, z)$
2. On forme $A_{1i}(x, y, z)$ à partir de (12.3) (cf annexe E).
3. On moyenne ensuite A_{1i} sur les plans homogènes pour obtenir $\langle A_{1i} \rangle_{xy}(z, t)$.
4. On calcule enfin la valeur rms du terme grâce à (12.2).

12.2 Couple N2/O2

Les différentes SND effectuées sur la couche de mélange N_2/O_2 ont permis d'étudier les effets de nombre de Reynolds, de compressibilité et de température.

12.2.1 Paramètres

Les paramètres des simulations sont détaillés en table 12.1.

	N_2/O_2 #1	N_2/O_2 #2	N_2/O_2 #5	N_2/O_2 #3	N_2/O_2 #4	N_2/O_2 #6
Re_{ref}	100	100	200	400	200	100
M_c	0.293	0.586	0.880	0.293	0.293	0.246
U (m/s)	± 100	± 200	± 300	± 100	± 100	± 100
T_2/T_1 (K)	300/300	300/300	300/300	300/300	600/600	600/300
$Lx \times Ly \times Lz$	$40 \times 40 \times 80$	idem #1	$40 \times 40 \times 40$	$28 \times 28 \times 40$	idem #1	idem #1
$Nx \times Ny \times Nz$	$181 \times 181 \times 245$	idem #1	$255 \times 255 \times 257$	idem #5	idem #1	idem #1
(a, b)	(0.05,3)	(0.05,3)	(0.5,3)	(0.05,3)	(0.05,3)	(0.05,3)

TAB. 12.1 – Paramètres des différentes SND du cas N_2/O_2 .

Dans tous les cas on a choisi un domaine suffisamment grand pour éviter une saturation trop rapide de la boîte de calcul. Le nombre de points de discrétisation choisi garantit une bonne résolution des détails de l'écoulement, il est contrôlé en pratique par le critère de positivité des concentrations ($0 \leq Y \leq 1$).

La simulation de référence est N_2/O_2 #1. Il s'agit d'un cas isotherme ($T = 300K$ initialement), faiblement compressible ($M_c = 0.293$), à bas nombre de Reynolds initial ($Re_{ref} = 100$).

L'effet du *nombre de Reynolds* est observé sur la simulation #3 ($Re_{ref} = 400$) où la boîte de calcul a été réduite et le nombre de points de maillage augmenté pour accroître la résolution générale et assurer la stabilité du calcul.

Les effets de *compressibilité* sur les termes sous-mailles sont constatés à travers les calculs #2 ($M_c \approx 0.6$) et #5 ($M_c \approx 0.9$). A mesure que le nombre de Mach convectif augmente, la couche de mélange devient plus difficile à déstabiliser. Pour #2 on a gardé une intensité de bruit de 5% de U alors que pour #5 il a fallu passer à 50% pour assurer la transition de l'écoulement.

L'effet de *température* est examiné au travers des simulations #4 (identique à #1 mais à $T = 600K$) et #6 où la répartition de température initiale est $T_{N_2} = 600K$ et $T_{O_2} = 300K$.

12.2.2 Champs instantanés

Les iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène sont représentées en figure (12.2) à $t = 100$ pour les cas #1 #2 #5 et #6. A part pour #2, à $t = 100$ les instabilités de Kevin-Helmholtz ont donné naissance à des structures cohérentes qui ont évolué vers un état de turbulence.

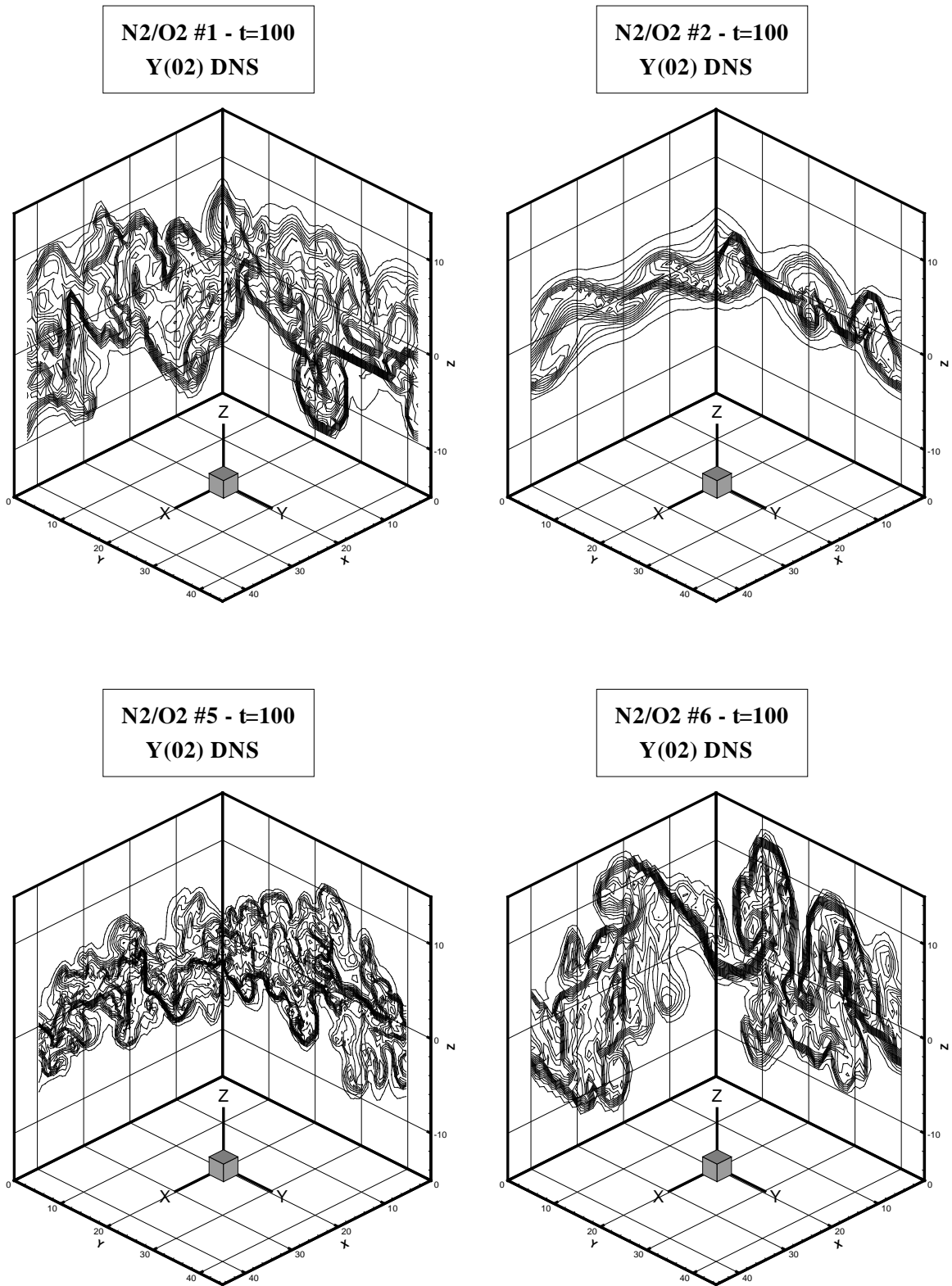


FIG. 12.2 – Iso-valeurs de la fraction massique d'oxygène à $t = 100$ des cas N_2/O_2 #1, #2, #5 et #6 sur les plans $x = 0$ et $y = 0$.

12.2.3 Statistiques

Échelles de Taylor

L'intensité de la turbulence de l'écoulement est évaluée grâce au nombre de Reynolds construit sur les échelles de Taylor (eq. 12.1). L'évolution temporelle de Re_λ est tracée en figure (12.3). A $t = 100$ on obtient des valeurs comprises entre 50 (pour #2) et 100 (pour #3), ainsi qu'une répartition spatiale dissymétrique autour de $z = 0$ signes de l'établissement d'une turbulence développée.

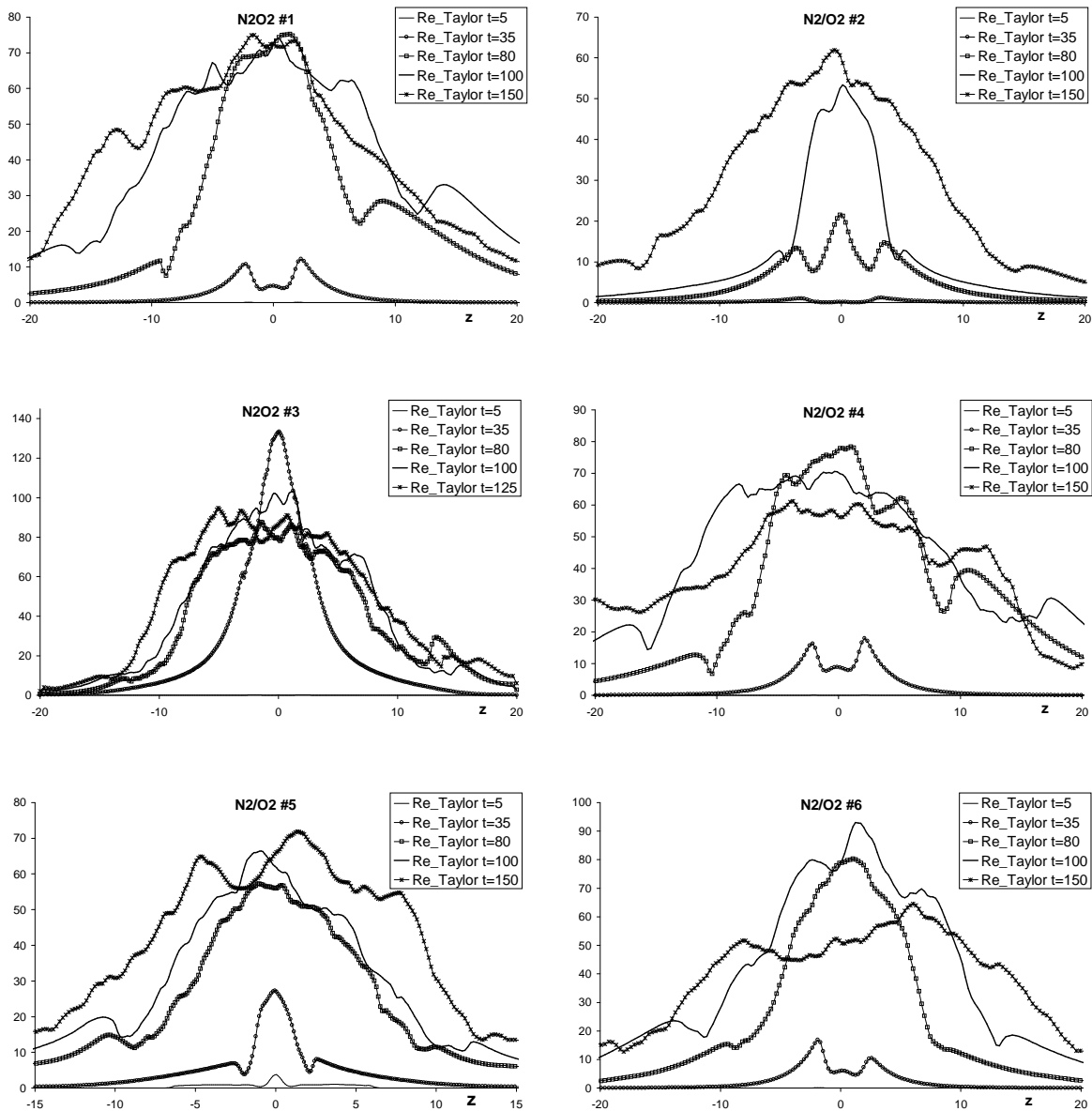


FIG. 12.3 – Nombre de Reynolds construit sur les échelles de Taylor des cas N_2/O_2 #1 à #6.

Épaisseurs statistiques

Les épaisseurs de vorticité et de quantité de mouvement sont tracées en figure (12.4) où, pour plus de lisibilité, on a séparé les différents effets.

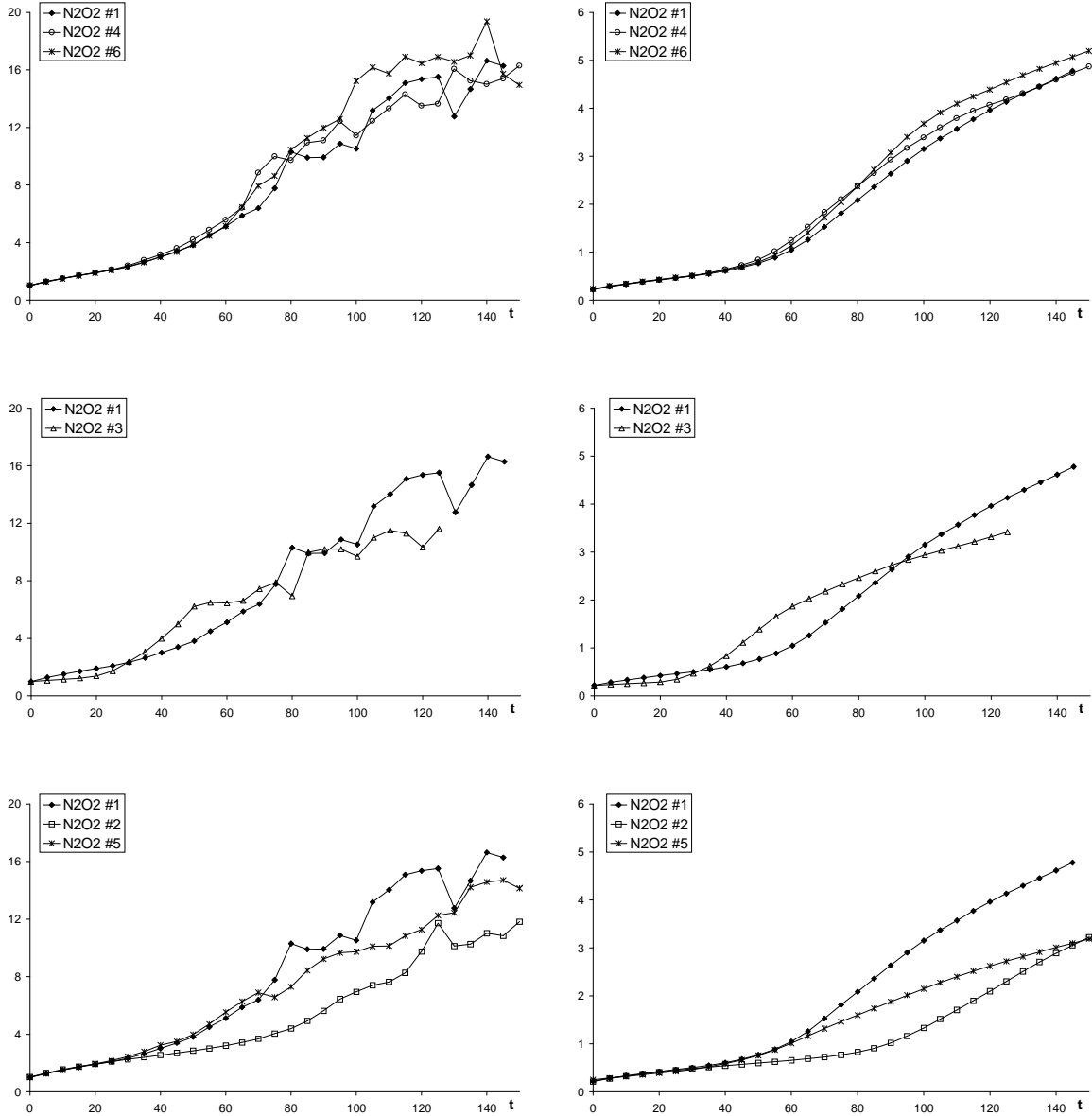


FIG. 12.4 – Épaisseurs statistiques de vorticité (gauche) et de quantité de mouvement (droite) des cas N_2/O_2 #1 à #6. Effet de température (haut), de Re_{ref} (milieu) et de M_c (bas).

Globalement, ces courbes présentent trois phases :

- une phase de croissance linéaire aux premiers instants de la simulation, où deux effets se conjuguent : diffusion visqueuse et amplification par la dynamique.
- une phase de croissance non linéaire où les appariements tourbillonnaires ont un rôle important dans le processus de mélange,
- et une phase de saturation où seule une grosse structure est présente une fois la boîte de calcul saturée (visible uniquement pour #3).

Lors des calculs liés à l'effet de *température*, les cas #1, #4 et #6 montrent une phase de croissance linéaire identique. Durant cette phase la température se comporte comme un scalaire passif, la conduction est surpassée par la convection : les structures cohérentes de l'écoulement entraînent du fluide chaud dans le fluide froid, et inversement, assurant ainsi l'homogénéisation de la couche de mélange. Les simulations ont ensuite des comportements propres et des états stables différents.

L'effet de *nombre de Reynolds* est également important. Comparativement au cas #1, la simulation #3 montre une phase de croissance linéaire différente confirmant les résultats de l'analyse de stabilité menée en section 11.4. La viscosité retarde la transition de l'écoulement mais ne semble pas altérer la phase suivante de croissance non linéaire. Cette propriété assure, une fois la transition effectuée, aux SND à faible nombre de Reynolds de reproduire les phénomènes présents à haut Re .

L'effet de *compressibilité* est plus délicat à gérer numériquement. La phase de croissance linéaire est principalement gouvernée par la diffusion visqueuse jusqu'à $t = 30$ et ne montre pas de différence notable entre #1, #2 et #5. Néanmoins, pour une même amplitude de bruit initial, l'augmentation du nombre de Mach convectif retarde fortement l'apparition de la phase de croissance non linéaire, jusqu'à la rendre inexistante. Pour la simulation #5 à $M_c = 0.880$ une amplitude 5% est trop faible, on sort de la zone d'instabilité. On a choisi de forcer la transition à la turbulence en augmentant légèrement le nombre de Reynolds initial ($Re_{ref} = 200$) et fortement l'amplitude du bruit : 50% de U . Ceci assure d'obtenir un écoulement turbulent pleinement développé en un temps de calcul acceptable. La comparaison des statistiques de #5 à celles de #5 pour $Re_{ref} = 100$ et $(a, b) = (0.05, 3)$ est présentée en figure (12.5).

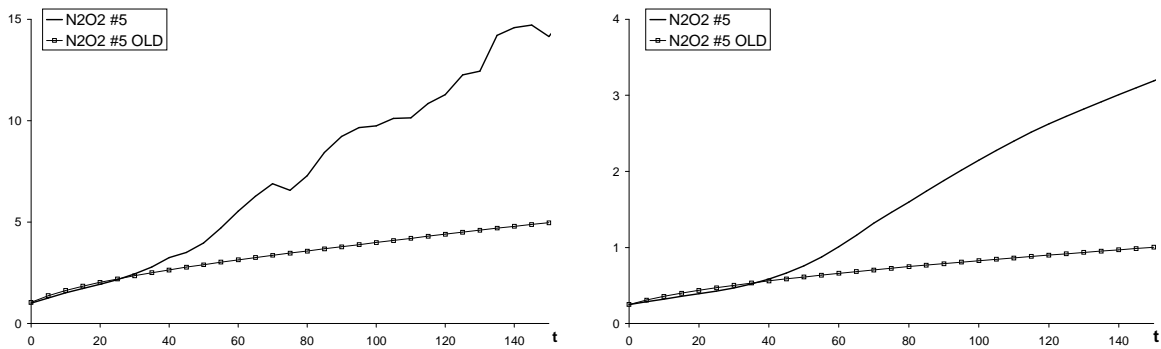


FIG. 12.5 – Effet de compressibilité sur le cas N_2/O_2 #5. Épaisseurs statistiques de vorticit  (gauche) et de quantit  de mouvement (droite) pour un bruit initial d'amplitude 5% (#5 OLD) et 50% (#5).

12.2.4 Termes sous-maille

Dans cette section on pr sente l' volution des intensit s des termes sous-mailles obtenus par filtrage explicite des champs de SND. Leur r partition spatiale, moyenn e selon les directions homog nes, est trac e en annexe E.

Énergie

L'évolution temporelle de l'intensité (eq. 12.2) des dix termes sous-maille de l'équation de l'énergie filtrée (3.23) est représentée en figure (12.6) en échelle logarithmique. On retrouve sur cette figure les phases de croissance linéaire, non linéaire et d'écoulement établi. Selon les paramètres de calcul ces phases ont des durées plus ou moins longues, mais à $t = 100$ les simulations présentent toutes une zone établie où les intensités des termes sous-maille demeurent quasi constantes au cours du temps. L'objectif de ces calculs étant d'obtenir les ordres de grandeur des termes sous-maille prépondérants qu'il faudrait modéliser, on ne s'intéresse qu'à la phase établie et on choisit le temps $t = 100$ comme référence. A $t = 100$ ces mêmes termes sont représentés sous forme d'histogramme en figure (12.7).

Pour les simulations *isothermes* on note que B_{10} , associé à la dissipation visqueuse, est prépondérant. L'accroissement du nombre de Reynolds entre #1 ($Re_{ref} = 100$) et #3 ($Re_{ref} = 400$) ne modifie pas l'amplitude relative des termes sous-maille; la gamme d'échelles augmentant dans l'écoulement, l'intensité des termes sous-maille augmente également. Vreman [112] constate également ce phénomène dans un cas mono-espèce mais avec une amplitude moindre. Compte tenu du caractère isotherme de nos simulations, le terme moteur est issu de la dynamique et il paraît logique que celui-ci soit prépondérant. Les autres termes d'importance sont B_6 (transport d'espèce), B_8 (transport d'énergie interne) et B_9 (pression dilatation), les autres sont négligeables.

Toujours pour le cas isotherme à $T = 300K$, on remarque en figure (12.7) que les termes B_9 et B_6 ont des intensités égales et que B_8 en est proche. Ceci peut se démontrer en supposant :

- HYP#1 : $\rho \approx cste$.
- HYP#2 : $T \approx cste \approx T_0$, température de référence du calcul des enthalpies (eq. 1.1).
- HYP#3 : le champ de vitesse possède les variations spatiales les plus importantes.

La première hypothèse (HYP#1) implique que le filtrage de Favre est réduit au filtrage classique : $\tilde{\cdot} \approx \bar{\cdot}$. En combinaison avec HYP#2, B_9 devient :

$$B_9 \approx \rho (r_1 - r_2) T \{ \overline{Y u_{j,j}} - \overline{Y} \overline{u_{j,j}} \}$$

La seconde hypothèse (HYP#2) implique $\tilde{h}_1 \approx 0$ et $\tilde{h}_2 \approx 0$, soit pour B_6 :

$$B_6 \approx \rho (r_1 - r_2) T \{ \overline{Y u_j} - \overline{Y} \overline{u_j} \}_{,j}$$

La troisième hypothèse (HYP#3) permet de négliger la contribution de $Y_{,j}$ par rapport à $u_{j,j}$ et d'arriver à la relation $B_6 \approx B_9$.

Pour le terme dynamique B_8 la relation $\rho h = \rho e + p$ se réduit à $p \approx -\rho e$ grâce à HYP#2 et HYP#3 conduit à $B_8 \approx -B_9$.

On a donc au final :

$$B_6 \approx B_9 \approx -B_8$$

Les effets de Re et M_c sont faibles sur cette relation. Ces égalités ne sont valables qu'au voisinage de T_0 et disparaissent pour le calcul #4, isotherme également, mais à 600K pour lequel l'HYP#2 n'est plus valable.

Dans un cas plus général, comme N_2/O_2 #6, on brise toute symétrie de l'écoulement et l'importance relative des termes sous-maille évolue fortement, faisant ressortir B_8 . L'augmentation des transferts de chaleur et du rapport de densité diminuent la contribution de B_{10} , B_6 et B_9 restant toujours significatifs. B_5 , qui traduit le transport *instationnaire* de l'enthalpie sous-maille, s'ajoute au bilan, tout comme B_7 dans une moindre mesure.

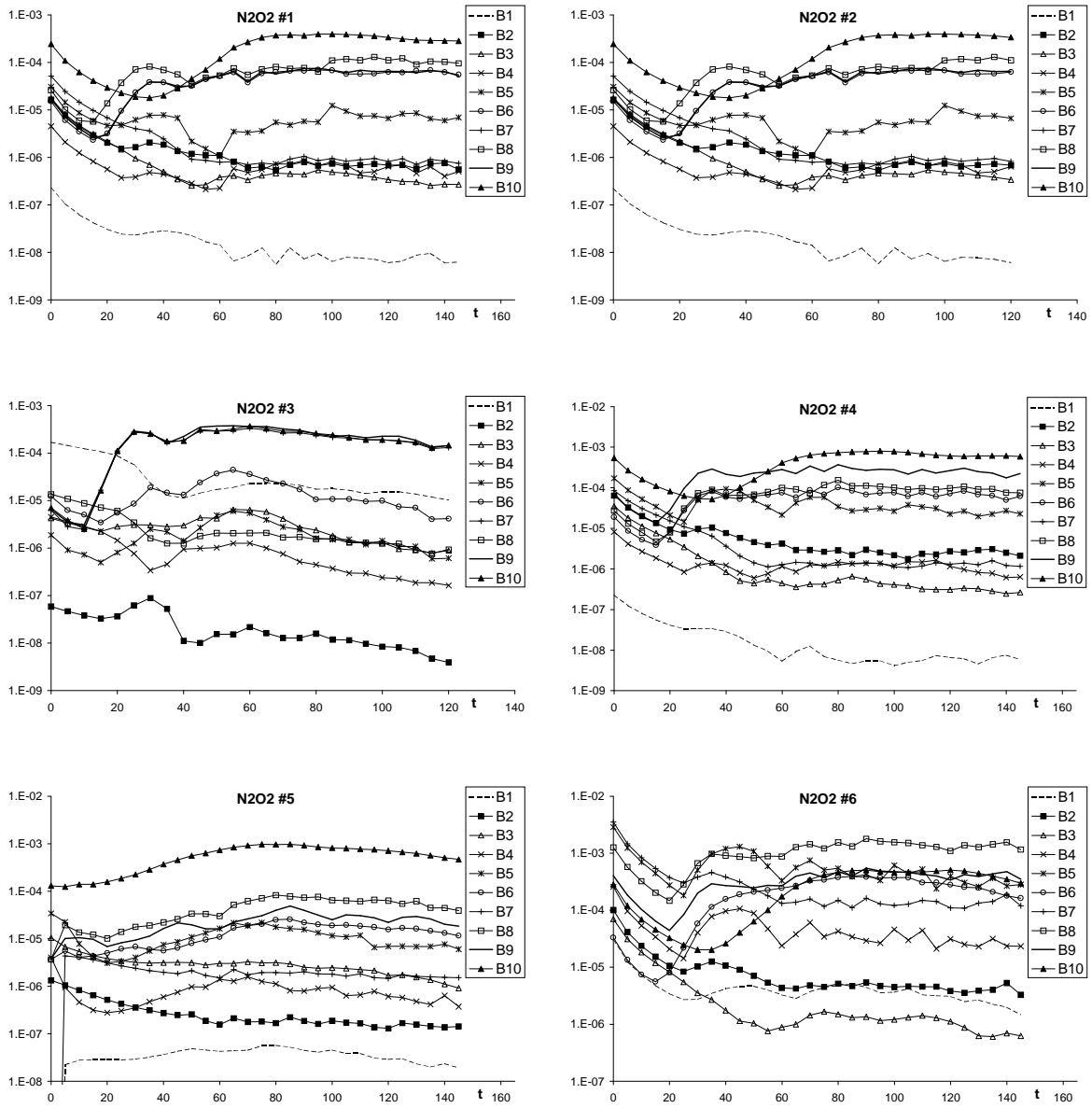


FIG. 12.6 – Évolution temporelle de l'intensité des termes sous-mailles de l'équation de l'énergie pour N_2/O_2 .

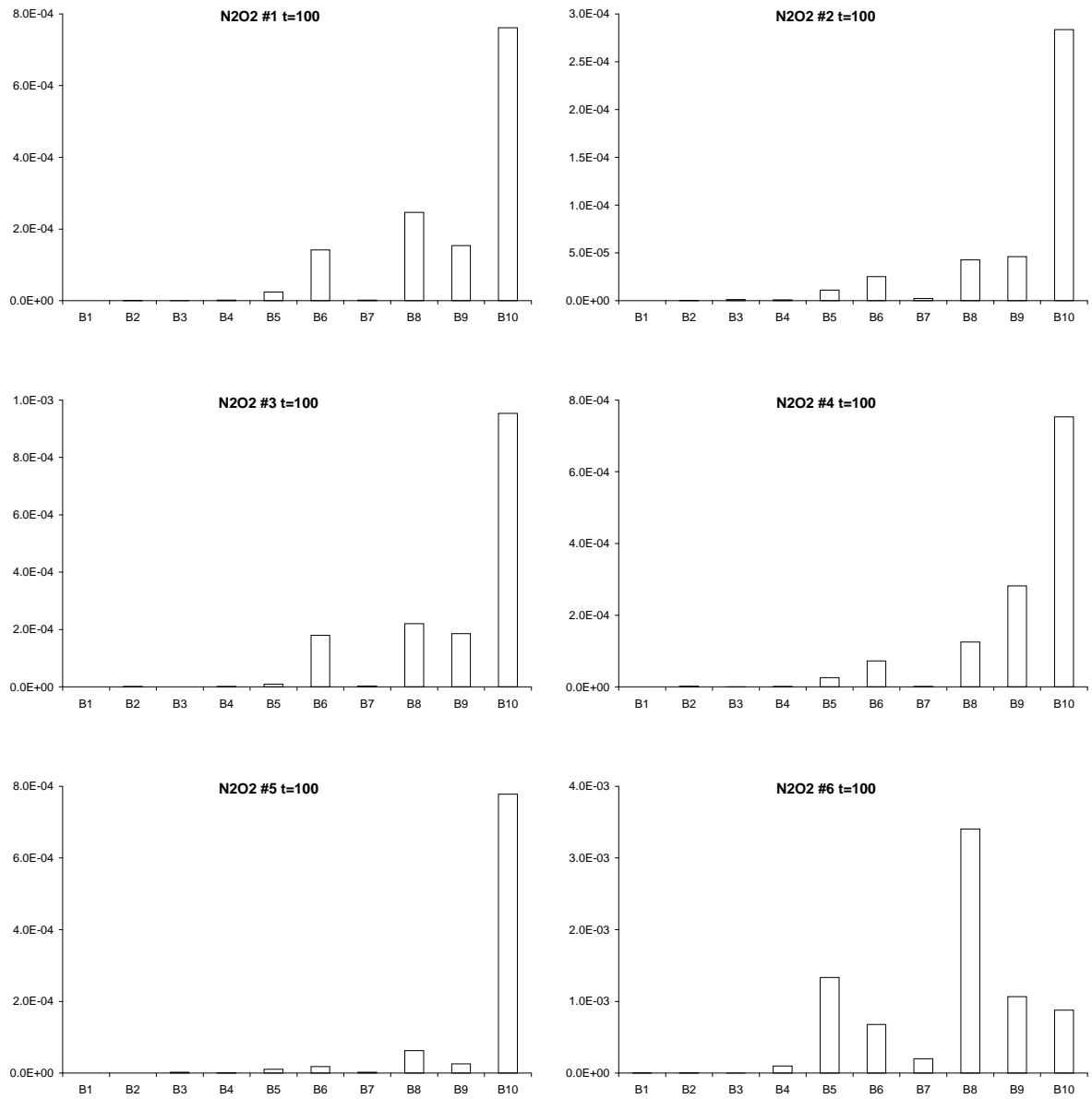


FIG. 12.7 – Termes sous-maillages de l'équation de l'énergie pour le couple N₂/O₂.

Quantité de mouvement

Le bilan mené sur les équations de quantité de mouvement (eq. 3.19) montre que A_{2i} est toujours négligeable (fig. 12.8), soit : $\bar{\sigma}_{ij} = \hat{\sigma}_{ij}$.

Le terme prépondérant est issu de la dynamique : A_{1i} , sauf pour le cas chauffé où le terme de pression A_{3i} devient équivalent dans la direction normale à l'écoulement.

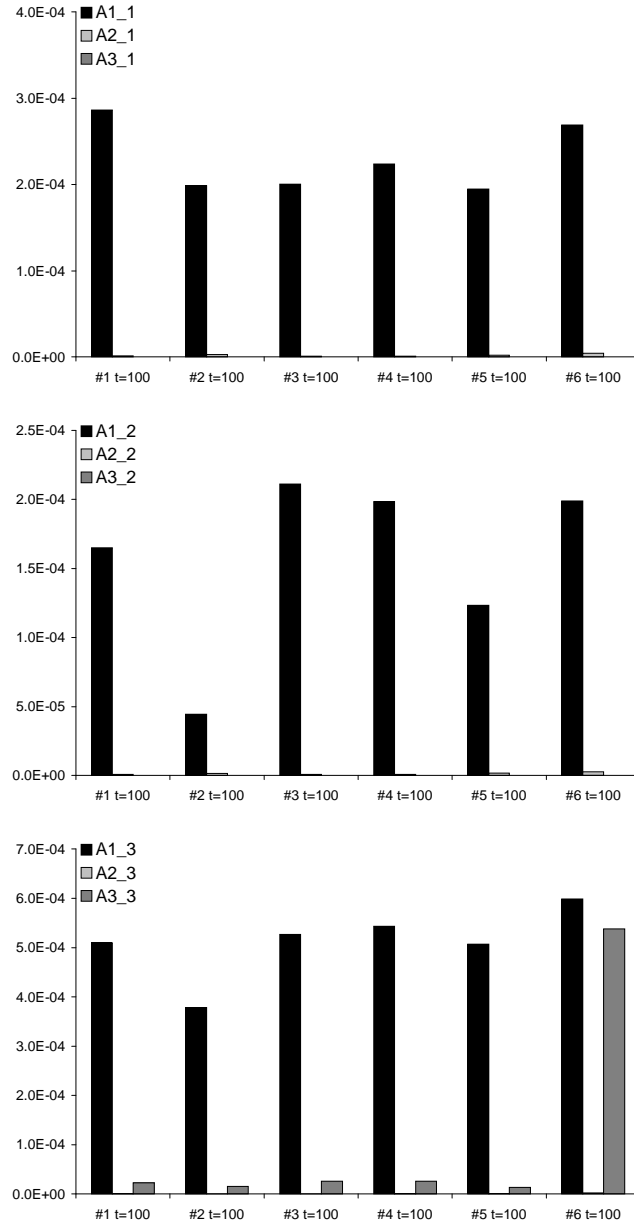


FIG. 12.8 – Termes sous-maillages des équations de quantité de mouvement selon x (haut), y (milieu) et z (bas) pour le couple N_2/O_2 .

Espèces

Pour l'équation des espèces (fig. 12.9), le terme dynamique C_1 est le plus important. Quelle que soit la simulation on peut considérer en première approximation que $C_2 \approx 0$, d'où :

$$\bar{J}_j = -D\bar{\rho}\tilde{Y}_j \approx \hat{J}_j = -D\bar{\rho}\tilde{Y}_j$$

Cette relation est cohérente avec l'hypothèse HYP#3.

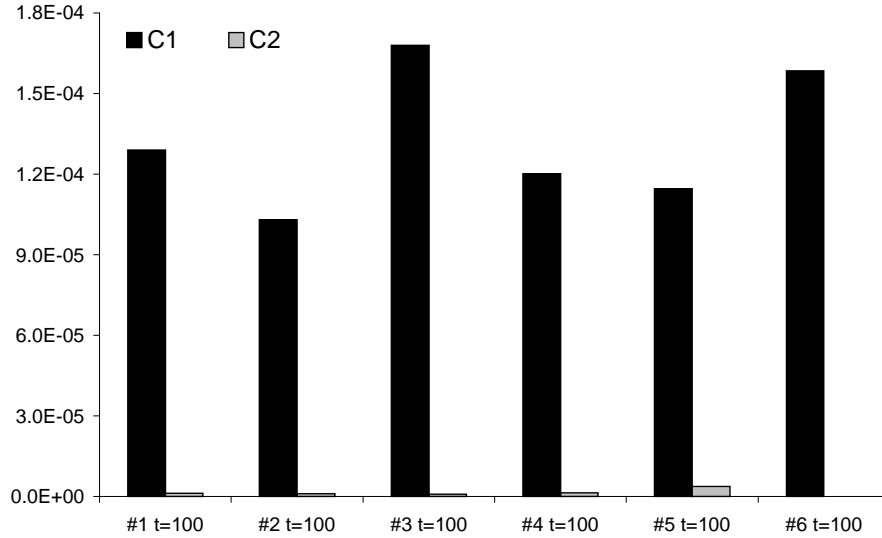


FIG. 12.9 – Comparaison des termes sous-mailles de l'équation des espèces pour le couple N₂/O₂.

Loi d'état

Au niveau de la loi d'état, le terme sous maille (\check{p}) issu du filtrage de p (eq. 3.37) a une amplitude négligeable par rapport à \hat{p} (fig. 12.10). Le bilan des équations de quantité de mouvement a néanmoins montré que les dérivées spatiales de \check{p} , i.e. le terme $A_{3i} = \check{p}_{,i}$, ne sont pas négligeables par rapport au terme de dynamique A_{1i} , notamment dans le cas chauffé #6 (fig. 12.8).

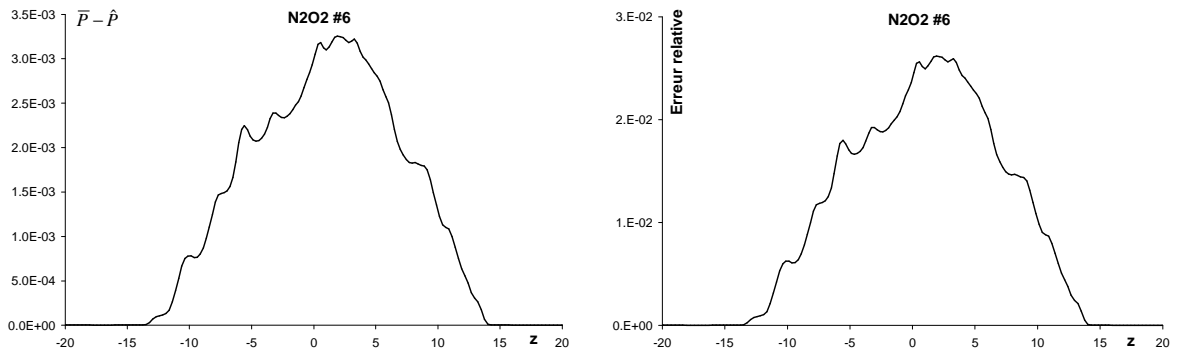


FIG. 12.10 – Répartition spatiale de \check{p} à gauche et erreur relative par rapport à \bar{p} en % à droite, pour le cas N₂/O₂#6.

12.2.5 Synthèse

La compilation des études menées sur le cas N_2/O_2 , à rapport de densité proche de l'unité, a permis de dégager les ordres de grandeur des différents termes sous-maille.

Loi d'état

La pression sous-maille est négligeable sur l'amplitude de la pression filtrée :

$$\bar{p} \approx \hat{p} = \bar{p} \left(r_2 + (r_1 - r_2) \tilde{Y} \right) \tilde{T}$$

mais sa variation ne l'est pas dans le cas chauffé.

Équations de quantité de mouvement

Quelle que soit l'équation considérée on a quasi égalité des contraintes visqueuses sous-maille :

$$\bar{\sigma}_{ij} \approx \hat{\sigma}_{ij}$$

La modélisation de la variation du terme de pression sous-maille selon la direction normale à l'écoulement est nécessaire dans le cas chauffé où il est du même ordre de grandeur que le terme de dynamique.

	N_2/O_2 #1	N_2/O_2 #2	N_2/O_2 #3	N_2/O_2 #4	N_2/O_2 #5	N_2/O_2 #6
A_{1i}	++	++	++	++	++	++
A_{2i}	0	0	0	0	0	0
A_{3i}	0	0	0	0	0	++

Équation de l'énergie

Pour les écoulements initialement isothermes B_{10} est prépondérant, la température est assimilée à un scalaire passif. Le cas avec gradient de température initial fait ressortir fortement la contribution du terme dynamique B_8 .

	N_2/O_2 #1	N_2/O_2 #2	N_2/O_2 #3	N_2/O_2 #4	N_2/O_2 #5	N_2/O_2 #6
B_1	0	0	0	0	0	0
B_2	0	0	0	0	0	0
B_3	0	0	0	0	0	0
B_4	0	0	0	0	0	-
B_5	-	-	-	-	-	+
B_6	+	+	+	+	-	+
B_7	0	0	0	0	0	-
B_8	+	+	+	+	+	++
B_9	+	+	+	+	-	+
B_{10}	++	++	++	++	++	+

Équation des espèces

Le terme C_2 dû à la non linéarité du flux diffusif de l'équation de transport de fraction massique est négligeable :

$$\overline{J}_j = -D\overline{\rho}\widetilde{Y}_{j,j} \approx \widehat{J}_j = -D\overline{\rho}\widetilde{Y}_{j,j}$$

	N_2/O_2 #1	N_2/O_2 #2	N_2/O_2 #3	N_2/O_2 #4	N_2/O_2 #5	N_2/O_2 #6
C_1	++	++	++	++	++	++
C_2	0	0	0	0	0	0

12.3 Couple H2/O2

L'effet de densité est introduit en examinant les résultats de SND sur le couple H2/O2.

12.3.1 Paramètres

Les paramètres des différentes simulations sont détaillés en table 12.2. Comme pour N_2/O_2 on fait varier les nombres de Mach convectif, de Reynolds et on étudie l'effet de température. La simulation de référence, H_2/O_2 #1, utilise des paramètres identiques au cas N_2/O_2 #1. A $Re_{ref} = 200$, le calcul H_2/O_2 #3 s'est avéré sous-résolu et donc instable dès

	H_2/O_2 #1	H_2/O_2 #2	H_2/O_2 #4	H_2/O_2 #3	H_2/O_2 #5
Re_{ref}	100	100	200	200	100
M_c	0.121	0.243	0.607	0.121	0.113
U (m/s)	± 100	± 200	± 500	± 100	± 100
T_2/T_1 (K)	300/300	300/300	300/300	300/300	600/300
$Lx \times Ly \times Lz$	$33 \times 33 \times 60$	$20 \times 20 \times 60$	$20 \times 20 \times 60$	$33 \times 33 \times 60$	$20 \times 20 \times 60$
$Nx \times Ny \times Nz$	$199 \times 199 \times 485$	$199 \times 199 \times 485$	$199 \times 199 \times 485$	$199 \times 199 \times 485$	$199 \times 199 \times 485$
(a,b)	(0.05,3)	(0.05,3)	(0.05,3)	(0.05,3)	(0.05,3)

TAB. 12.2 – Paramètres des différentes SND du cas H_2/O_2 .

$t=40$. Compte tenu du coût des simulations il n'a pas été possible d'envisager un calcul à résolution supérieure. L'étude des effets de Re à bas M_c n'a donc pas pu être menée.

Les effets de *compressibilité* sont examinés sur les cas isothermes #2 et #4 où l'on passe respectivement de $M_c \approx 0.25$ à $M_c \approx 0.6$.

L'effet de *température* est pris en compte sur H_2/O_2 #5 où l'on chauffe le dioxygène, réduisant ainsi le rapport de densité.

12.3.2 Champs instantanés

Les iso-valeurs du champ de fraction massique d'oxygène sont représentées en figure (12.11) à $t = 100$ pour les cas #1 #2 #4 et #5. Comme pour les tests 2D de la section 8.3, l'écoulement présente une évolution nettement plus complexe que pour le cas à faible différence de densité. On constate également une amplitude moindre de la zone de mélange, signe d'un retard de la transition à la turbulence, conformément aux prédictions de l'analyse de stabilité linéaire (chapitre 11).

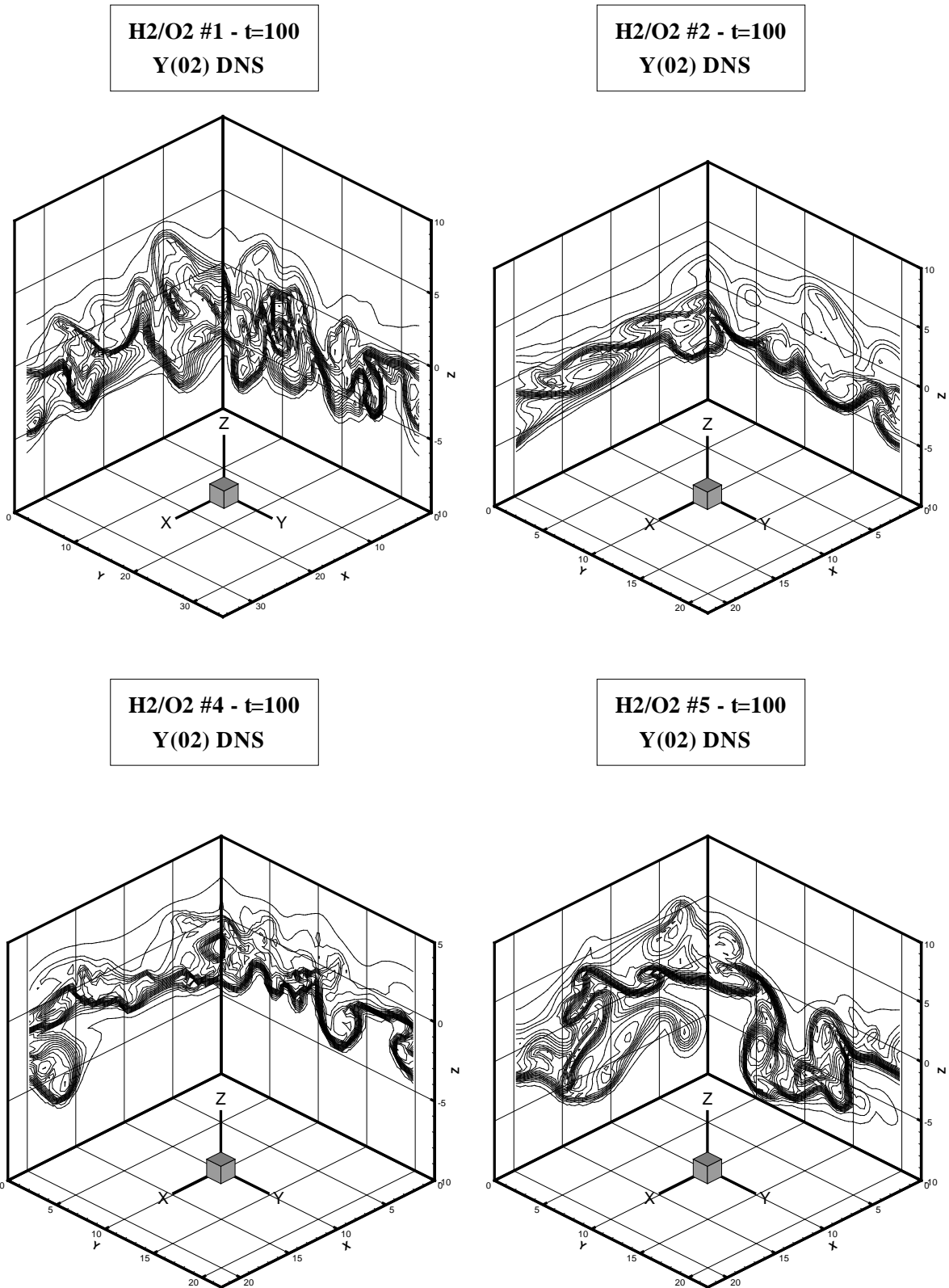


FIG. 12.11 – Fraction massique à $t = 100$ des cas H_2/O_2 #1, #2, #4 et #5.

12.3.3 Statistiques

Échelles de Taylor

L'intensité de la turbulence de l'écoulement est évaluée grâce au nombre de Reynolds construit sur les échelles de Taylor (eq. 12.1). L'évolution temporelle de Re_λ est tracée en figure (12.12). A $t = 100$ on obtient des valeurs comprises entre 40 (pour #2) et 80 (pour #5). On notera une nette évolution temporelle de la frontière de la zone de mélange (maximum de Re_λ) depuis le gaz lourd vers le gaz léger.

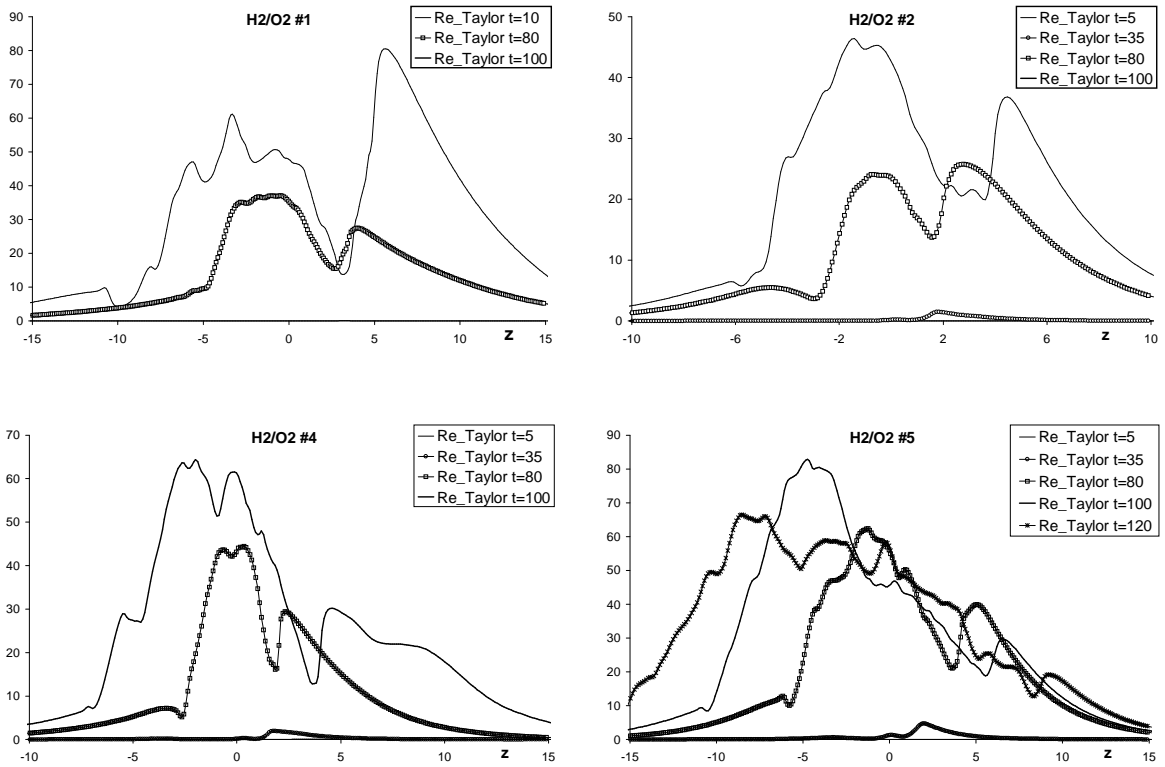


FIG. 12.12 – Nombre de Reynolds construit sur les échelles de Taylor des cas H₂/O₂ #1, #2, #4 et #5.

Épaisseurs statistiques

Les épaisseurs de vorticité et de quantité de mouvement sont tracées en figure (12.13). Comparativement au cas N₂/O₂, la zone de croissance linéaire est plus longue et à $t = 100$, aucune des boîtes de calcul n'est saturée.

Comme pour le mélange N₂/O₂, la *température* peut être assimilée à un scalaire passif durant la phase de croissance linéaire. La réduction du rapport de densité du cas chauffé #5 permet une augmentation de l'entraînement.

L'effet de *compressibilité*, mis en évidence par les simulations #2 et #4, rend la couche de mélange beaucoup plus stable et prolonge la phase de croissance linéaire. Pour une amplitude initiale du bruit de 5%, le calcul à Mach convectif 0.6 est à peine déstabilisé et comme dans le cas N₂/O₂ les effets visqueux deviennent alors prépondérants, modifiant la zone de croissance linéaire des courbes de la figure (12.13).

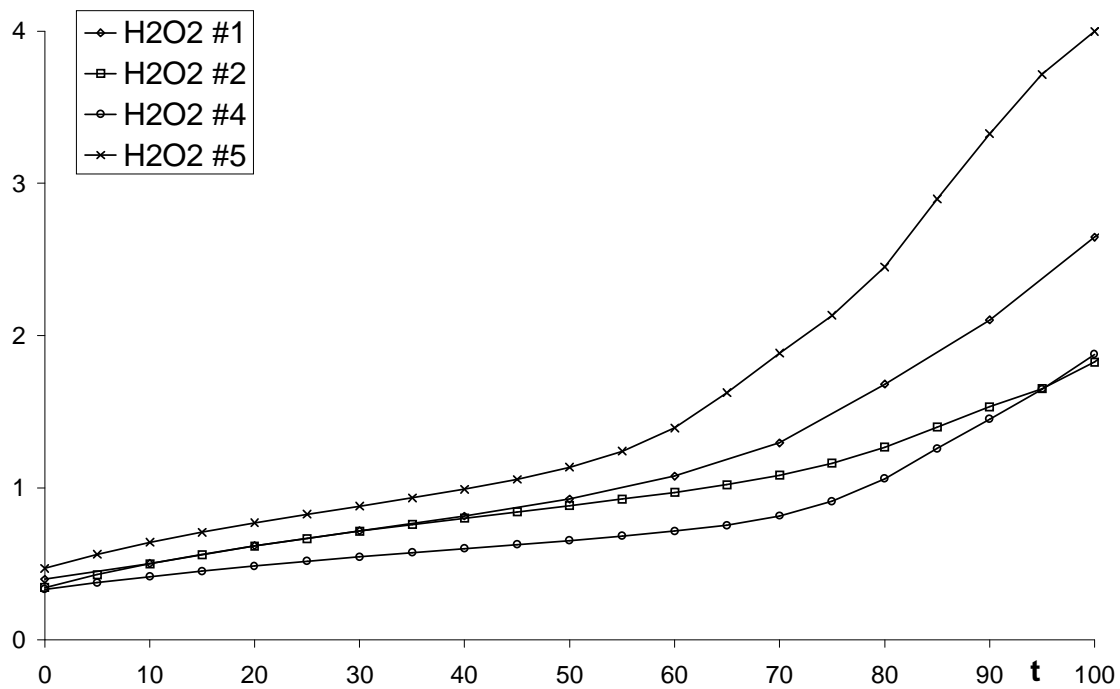
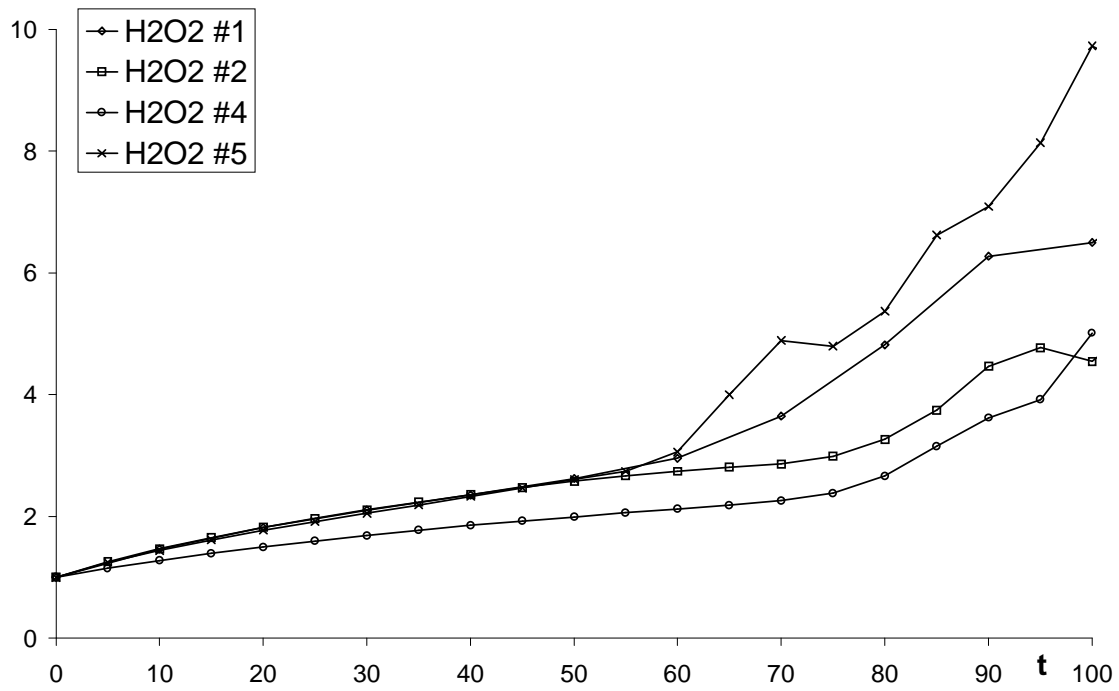


FIG. 12.13 – Épaisseurs statistiques de vorticité (haut) et de quantité de mouvement (bas) des cas H_2/O_2 #1, #2, #4 et #5.

12.3.4 Termes sous-maille

Dans cette section on présente l'évolution des intensités des termes sous-mailles obtenus par filtrage explicite des champs de SND. Leur répartition spatiale, moyennée selon les directions homogènes, est tracée en annexe E.

Énergie

L'évolution temporelle de l'intensité (eq. 12.2) des dix termes sous-maille de l'équation de l'énergie filtrée (3.23) est représentée en figure (12.14) en échelle logarithmique.

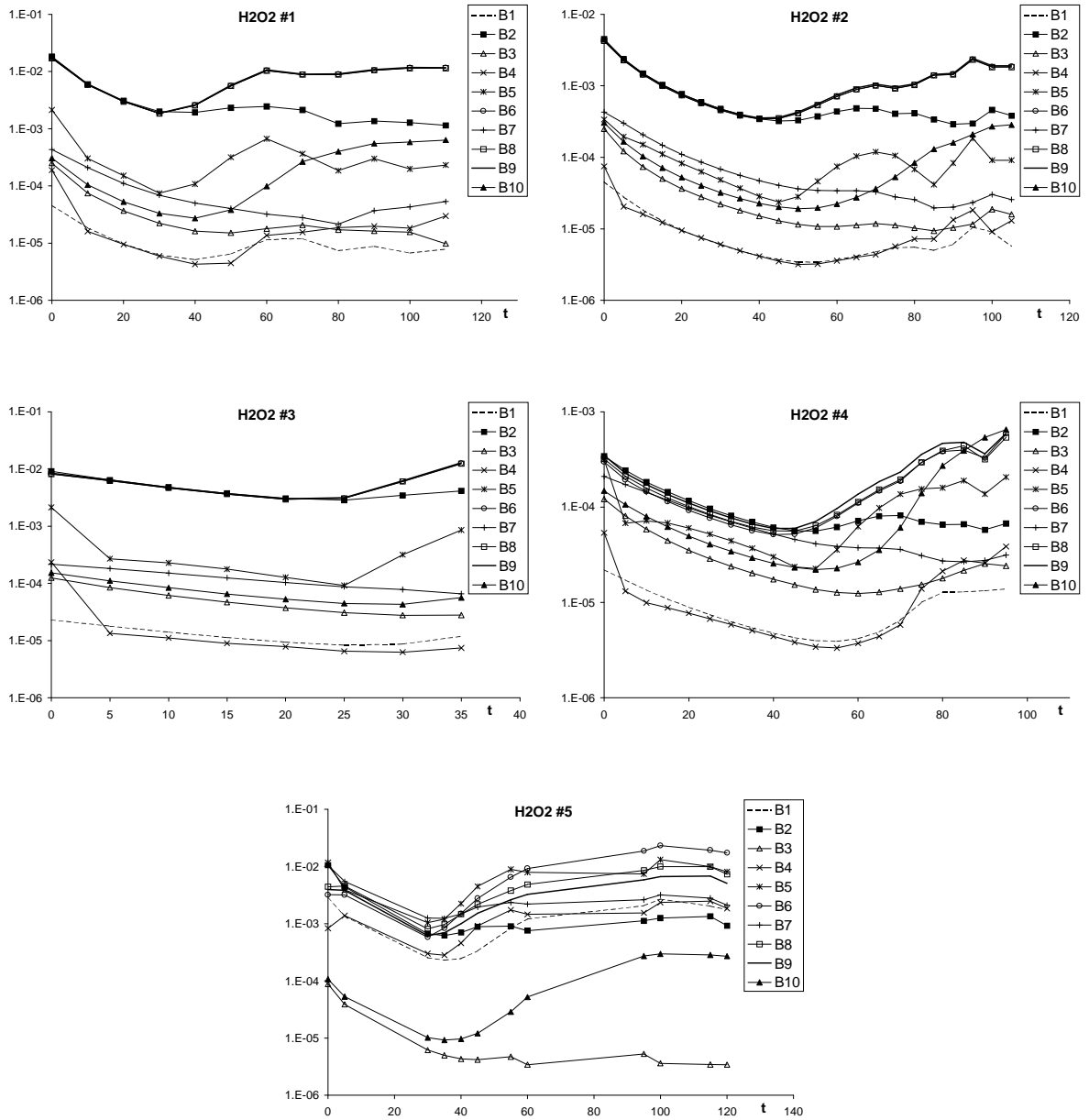


FIG. 12.14 – Évolution temporelle de l'intensité des termes sous-mailles de l'équation de l'énergie pour H₂/O₂.

Là encore, comme pour le mélange N_2/O_2 , on retrouve les phases de croissance linéaire, non linéaire et d'écoulement établi, sauf pour les cas #3 (instable) et #4 (à peine déstabilisé). Les résultats de ce dernier cas pourraient être améliorés en augmentant le nombre de Reynolds ou l'amplitude du bruit initial, ils devront donc être considérés avec précaution lors de leur interprétation.

Les intensités des différents termes sous-maille sont tracées sous forme d'histogramme en figure (12.15).

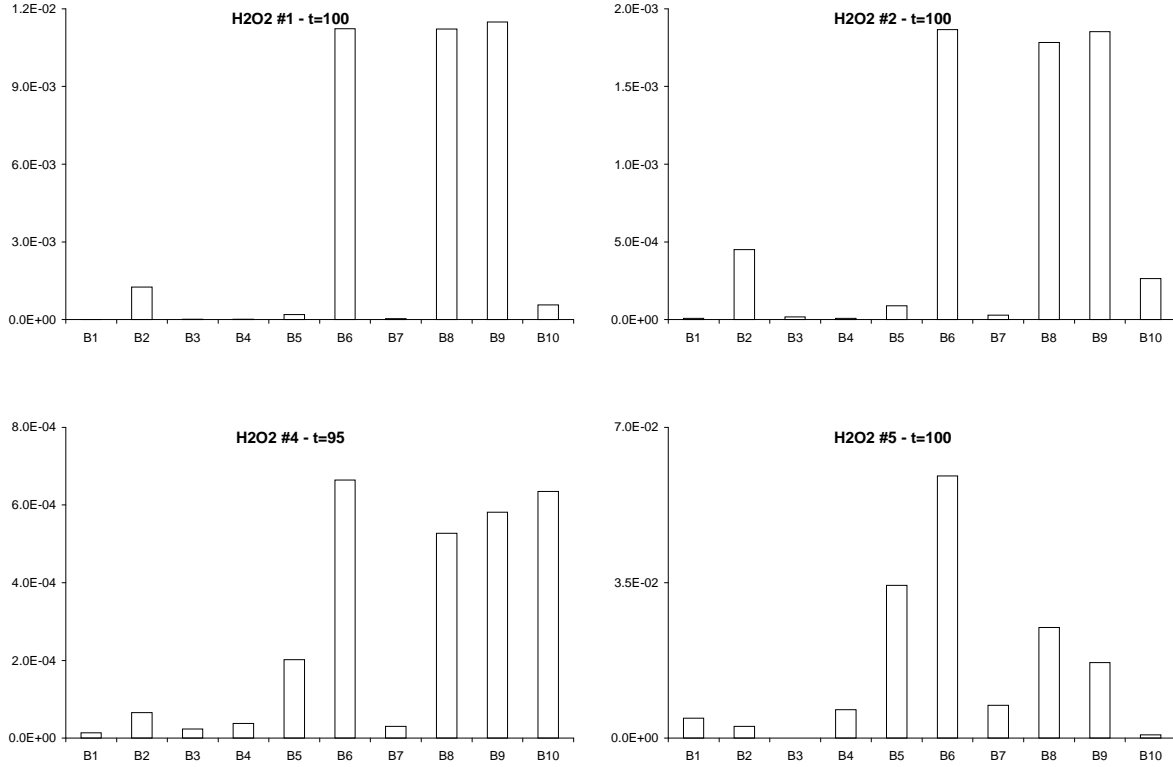


FIG. 12.15 – Termes sous-mailles de l'équation de l'énergie pour le couple H_2/O_2 .

Contrairement au cas N_2/O_2 , le terme B_{10} n'est plus réellement significatif dans le bilan, sauf pour le cas spécial #4. Les termes prépondérants des cas *isothermes* sont B_6 (transport d'espèce), B_8 (transport d'énergie interne) et B_9 (pression dilatation), suivis de plus loin par B_2 , B_5 et B_{10} .

Comme pour N_2/O_2 , toujours pour le cas isotherme à $T = 300K$, on remarque en figure (12.15) que les intensités de B_6 , B_8 et B_9 sont quasiment identiques. Ceci se démontre comme précédemment en supposant :

- HYP#1 : $r_1 \gg r_2 \rightarrow r \approx r_1 Y$.
- HYP#2 : $T \approx cste \approx T_0 \rightarrow h \approx 0$.
- HYP#3 : le champ de vitesse possède les variations spatiales les plus importantes.

Soit,

$$B_6 \approx B_9 \approx -B_8$$

Ces égalités ne sont plus valables dans le cas général #5, où le gradient initial de température fait ressortir les contributions de B_5 et B_6 tout en diminuant celles de B_8 et B_9 .

Quantité de mouvement

Les simulations à haut rapport de densité confirment qu'en première approximation A_{2i} est négligeable (fig. 12.16). Le terme dynamique, A_{1i} , est toujours important, mais maintenant la contribution de la variation de pression sous-maître selon la direction normale à l'écoulement est considérable quelle que soit la simulation, jusqu'à devenir prépondérante dans le cas chauffé.

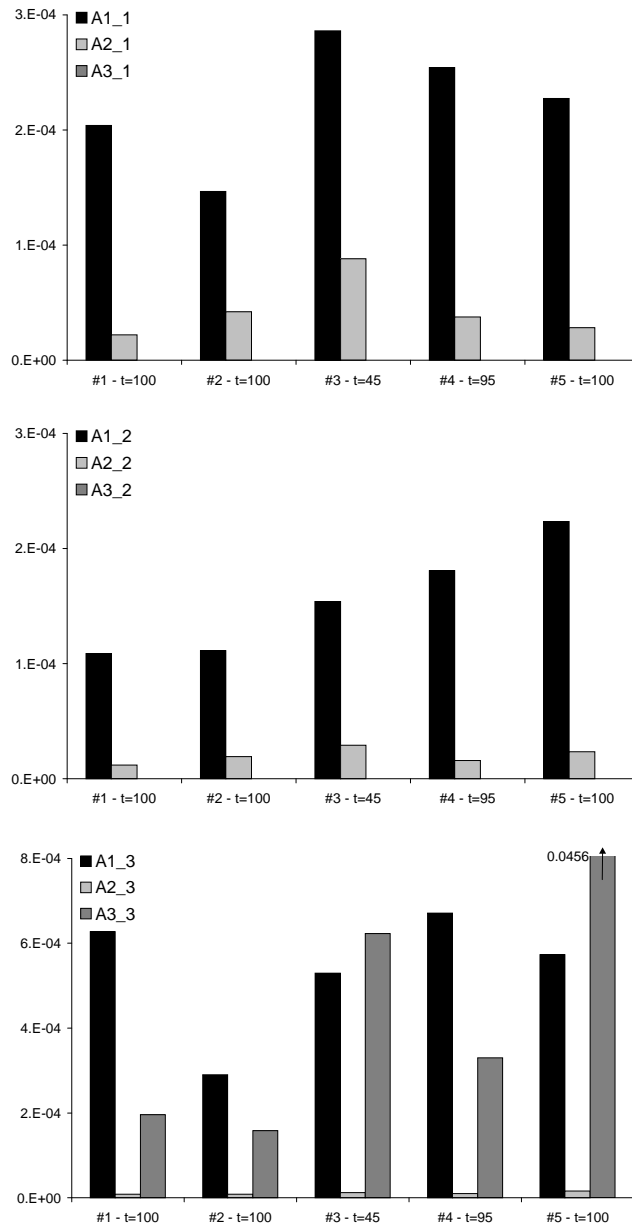


FIG. 12.16 – Termes sous-maîtres des équations de quantité de mouvement selon x (haut), y (milieu) et z (bas) pour le couple H_2/O_2 .

Espèces

Comme pour le mélange N_2/O_2 , le terme dynamique C_1 est le plus important (fig. 12.17). C_2 n'est plus nul mais pourra être considéré comme négligeable en première approximation.

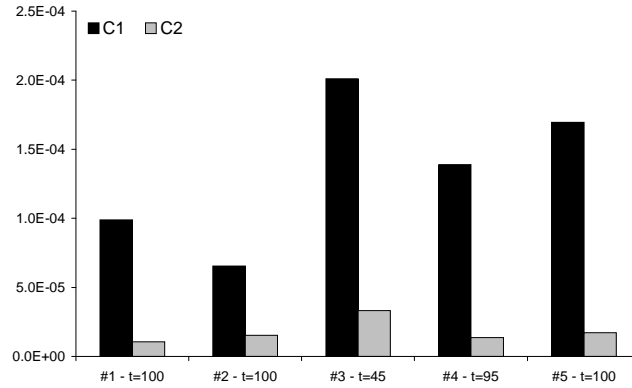


FIG. 12.17 – Comparaison des termes sous-mailles de l'équation des espèces pour le couple H_2/O_2 .

Loi d'état

Le bilan de quantité de mouvement a montré que les variations de pression sous-maille ne sont pas négligeables même si la contribution de \check{p} à \bar{p} est faible (fig. 12.10).

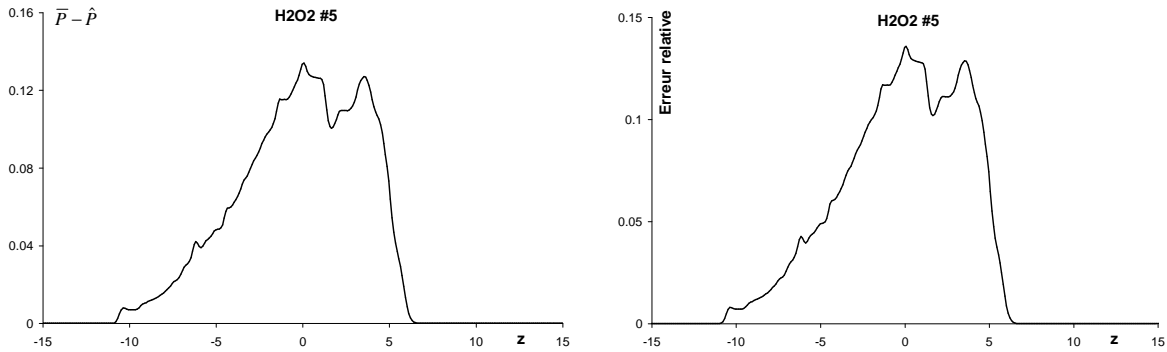


FIG. 12.18 – Répartition spatiale de \check{p} à gauche et erreur relative par rapport à \bar{p} en % à droite, pour le cas H_2/O_2 #5.

12.3.5 Synthèse

Comparativement aux résultats des calculs à densité voisine (N_2/O_2), les simulations à fort rapport de densité conduisent à des répartitions différentes des termes sous-mailles.

Loi d'état

La pression sous-maille est négligeable sur l'amplitude de la pression filtrée :

$$\bar{p} \approx \hat{p} = \bar{\rho} \left(r_2 + (r_1 - r_2) \tilde{Y} \right) \tilde{T}$$

mais sa variation ne l'est plus quel que soit le cas considéré.

Équations de quantité de mouvement

Les contraintes visqueuses sous-maille apportent une faible contribution au bilan, soit :

$$\bar{\sigma}_{ij} \approx \hat{\sigma}_{ij}$$

La forte anisotropie de l'écoulement impose une modélisation du terme de pression sous-maille quel que soit le mélange considéré lorsque les variations de densité sont élevées.

	H ₂ /O ₂ #1	H ₂ /O ₂ #2	H ₂ /O ₂ #5
A _{1i}	++	++	++
A _{2i}	0	0	0
A _{3i}	++	++	++

Équation de l'énergie

Contrairement au cas N₂/O₂, le terme sous-maille de dissipation visqueuse (B₁₀) n'est plus significatif. De plus, le gradient de température fait ressortir de manière importante la contribution du terme sous-maille de transport d'enthalpie (B₅).

	H ₂ /O ₂ #1	H ₂ /O ₂ #2	H ₂ /O ₂ #5
B ₁	0	0	-
B ₂	-	+	-
B ₃	0	0	0
B ₄	0	0	-
B ₅	-	-	+
B ₆	++	++	++
B ₇	0	0	-
B ₈	++	++	+
B ₉	++	++	+
B ₁₀	-	+	-

Équation des espèces

En première approximation on pourra encore considérer que la non linéarité du flux diffusif de l'équation de transport de fraction massique est négligeable :

$$\bar{J}_j = -D \bar{\rho} \tilde{Y}_{,j} \approx \hat{J}_j = -D \bar{\rho} \tilde{Y}_{,j}$$

	H ₂ /O ₂ #1	H ₂ /O ₂ #2	H ₂ /O ₂ #5
C ₁	++	++	++
C ₂	0	0	0

12.4 Synthèse

Ce chapitre, consacré à l'étude *a priori* des termes sous-maillages issus du filtrage des équations de Navier-Stokes bi-espèces, a permis d'isoler les effets de température, de compressibilité et de densité.

Les simulations N_2/O_2 isothermes sont proches du cas mono-espèce étudié par Vreman [112]. Elles font ressortir pour l'équation de l'énergie les contributions du terme de transfert de masse (B_6), de transport de l'énergie interne (B_8), de pression-dilatation (B_9) et de la dissipation visqueuse sous-maille B_{10} .

Lorsque le rapport de densité augmente, soit par chauffage soit par mélange d'espèces de masses molaires éloignées, la contribution de B_{10} est fortement réduite, alors que le terme instationnaire B_5 peut devenir important.

La compressibilité ne modifie pas cette analyse mais peut faire ressortir de manière excessive le terme associé à la dissipation visqueuse lorsque la couche de mélange devient difficile à déstabiliser.

Le principal effet de la densité est l'introduction d'une non linéarité supplémentaire dans la loi d'état qui possède des variations d'autant plus importantes que le rapport de densité est élevé. Au terme sous-maille classique τ_{ij} de l'équation de quantité de mouvement filtrée, il devient nécessaire d'ajouter la contribution de A_{3i} .

D'une manière générale les termes sous-maillages négligeables sont :

- *Quantité de mouvement* : A_{2i} , soit $\bar{\sigma}_{ij} \approx \hat{\sigma}_{ij}$.
- *Espèces* : C_2 , soit $\bar{J}_j \approx \hat{J}_j$.
- *Énergie* : B_1, B_2, B_3, B_4 et B_7 .

Les modèles sous-maille utilisés dans les simulations des grandes échelles d'écoulement multi-espèces devraient donc prendre en compte les contributions des autres termes. En pratique cela pourrait être réalisé grâce à l'emploi de modèles de type similarité d'échelle pour le calcul dynamique :

- des constantes dans les modèles à viscosité turbulente pour fermer l'équation de quantité de mouvement filtrée,
- des nombres de Pr et Sc sous-maille pour fermer les équations de l'énergie et des espèces, comme proposé par Vreman dans le cas mono-espèce [112]. Faute de temps, ces fermetures n'ont pas été testées dans le cadre de cette thèse.

Devant la complexité de la modélisation sous-maille du mélange d'espèces à fort rapport de densité, l'approche MILES (section 4.3) apparaît comme un moyen simple et efficace d'obtenir des informations pertinentes sur la physique simulée, surtout pour des calculs à caractère industriel. On présente en annexe F quelques exemples d'application du code WENO au mélange hydrogène/oxygène.

Conclusion générale

Les écoulements cisailés à masse volumique variable constituent un sujet de recherche important depuis un demi-siècle. La contribution de notre étude se situe principalement au niveau numérique et sur l'ensemble de notre travail, on peut retenir les résultats originaux suivants, classés, de notre point de vue, par ordre d'importance décroissante :

1. Identification de la contribution au bilan sous-maille des différents termes non calculables issus du filtrage des équations de Navier-Stokes compressibles bi-espèces, en vue de leur modélisation.
2. Étude des erreurs numériques liées à la discrétisation, dans l'espace physique, du terme non linéaire des équations de Navier-Stokes par clonage spectral et comparaison à l'action d'un modèle sous-maille.
3. Réduction de l'amplitude des ondes acoustiques générées lors du démarrage des calculs de couche de mélange bi-espèces par développement d'une solution en similitude temporelle.
4. Étude de la stabilité linéaire d'une couche de mélange bi-espèce sur la base de la solution en similitude temporelle.
5. Développement et optimisation de deux codes de calcul, l'un à haut pouvoir de résolution destiné aux études fondamentales, l'autre capable d'absorber les discontinuités des écoulements supersoniques en géométrie non triviale sur maillage structuré.
6. Extension du concept de nombre d'onde modifié aux schémas non linéaires.

Sur la base de nos résultats, les études futures pourraient s'orienter autour de deux axes :

- Modélisation sous-maille explicite et comparaison des résultats de SGE (code COMPACT) à des calculs MILES (code WENO) pour les écoulements de couche de mélange et de jet à fort rapport de masse volumique.
- Extension du code WENO aux écoulements réactifs.

Annexes

Annexe A

Paramètres thermodynamiques

Les paramètres thermodynamiques des fluides considérés lors de cette étude sont détaillés en tables A.1 et A.2 sur la base de Reid et al [85].

	W (kg/mol)	C_{p0} (J/mol/K)	C_{p1} (J/mol)	C_{p2} (J/mol · K)	C_{p3} (J/mol · K ²)
H_2	2.0160E-03	2.7140E+01	9.2740E-03	-1.3810E-05	7.6450E-09
N_2	2.8013E-02	3.1150E+01	-1.3570E-02	2.6800E-05	-1.1680E-08
O_2	3.1999E-02	2.8110E+01	-3.6800E-06	1.7460E-05	-1.0650E-08
<i>Air</i>	2.8850E-02	3.0512E+01	-1.0721E-02	2.4839E-05	-1.1464E-08

TAB. A.1 – Masse molaire et coefficients polynômiaux du coefficient de chaleur à pression constante

Le coefficient molaire de chaleur à pression constante est construit sur la base d'un polynôme de degré 3 :

$$C_p = \sum_{k=0}^3 C_{pk} T^k$$

	T_c (K)	V_c (m ³ /mol)	P_c (Pa)	ω	Σ_v
H_2	3.3000E+01	6.4300E-05	1.2900E+06	-2.1800E-01	6.1200E+00
N_2	1.2620E+02	8.9800E-05	3.3900E+06	3.9000E-02	1.8500E+01
O_2	1.5460E+02	7.3400E-05	5.0400E+06	2.5000E-02	1.6300E+01
<i>Air</i>	1.3200E+02	8.6600E-05	3.6400E+06	3.8000E-02	1.9700E+01

TAB. A.2 – Température, volume et pression critiques ainsi que paramètres acentriques et volume de diffusion.

Annexe B

La méthode WENO

Les schémas WENO, développés par Liu et al. [61], sont une extension des méthodes ENO initialement formulées par Harten et al. [42]. On présente dans cette annexe les points essentiels de la méthode en référence à l'article de synthèse de Shu [97].

B.1 Reconstruction et approximation 1D

On considère un domaine monodimensionnel découpé en N cellules (I_i) :

$$I_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \quad \text{pour } i = 1, \dots, N$$

où,

$$x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}}$$

Sur chaque cellule, on dispose au point milieu (x_i) de la valeur moyenne de la fonction v , notée \bar{v} (fig. B.1) :

$$x_i = \frac{1}{2} (x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}) \quad \text{et} \quad \Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$$

avec

$$\bar{v}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} v(\xi) d\xi$$

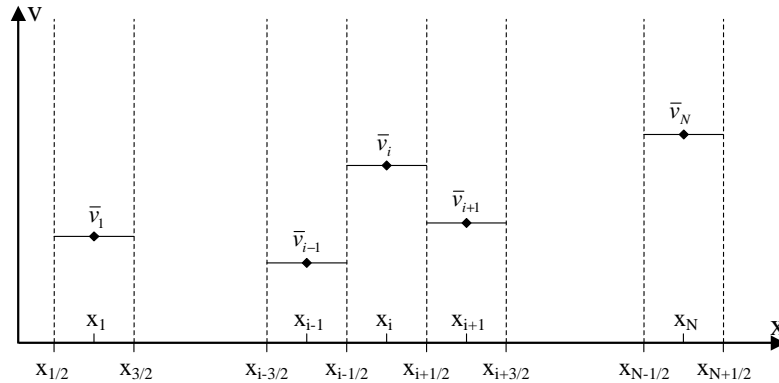


FIG. B.1 – Grille de reconstruction

B.1.1 Reconstruction par valeur moyenne

Connaissant les valeurs moyennes \bar{v}_i , on cherche pour chaque cellule I_i une approximation polynômiale d'ordre k de v . En particulier, aux interfaces :

$$v_{i+\frac{1}{2}} = v(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^k) \quad \text{avec} \quad \Delta x = \max_{1 \leq i \leq N} \Delta x_i$$

Pour le stencil $S_r(i) = \{I_{i-r}, \dots, I_{i+s}\}$ contenant I_i , r cellules à gauche et s à droite telles que $r + s = k - 1$, on obtient la reconstruction unique :

$$v_{i+\frac{1}{2}}^r = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} \bar{v}_{i-r+j} \quad r = 0, \dots, k-1$$

Les constantes c_{rj} sont données en table (B.1) pour $k = 3$.

r	$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$
0	1/3	5/6	-1/6
1	-1/6	5/6	1/3
2	1/3	-7/6	11/6

TAB. B.1 – Coefficients c_{rj} pour $k = 3$

B.1.2 Approximation conservative de la dérivée

Connaissant les valeurs nodales d'une fonction v :

$$v_i = v(x_i) \quad i = 1, \dots, N$$

on cherche le flux numérique $\hat{v}_{i+\frac{1}{2}}$ tel que la différence des flux soit une approximation d'ordre k de la fonction dérivée v' :

$$\frac{1}{\Delta x_i} \left(\hat{v}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{v}_{i-\frac{1}{2}} \right) = v'(x_i) + O(\Delta x^k) \quad i = 1, \dots, N$$

En supposant Δx_i constant, on peut se ramener au problème précédent en notant que si :

$$v(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi) d\xi$$

alors

$$v'(x) = \frac{1}{\Delta x} \left[h \left(x + \frac{\Delta x}{2} \right) - h \left(x - \frac{\Delta x}{2} \right) \right]$$

Il suffit donc de déterminer $\hat{v}_{i+\frac{1}{2}}$ tel que :

$$\hat{v}_{i+\frac{1}{2}} = h(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^k)$$

Ainsi sur le stencil $S_r(i)$ on aura :

$$\hat{v}_{i+\frac{1}{2}}^r = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj} v_{i-r+j}$$

B.1.3 Approximation WENO

A ce stade on dispose pour une cellule I_i donnée de plusieurs reconstructions $v_{i+\frac{1}{2}}^r$ dépendant du choix du stencil $S_r(i)$. La stratégie WENO consiste à utiliser toutes les reconstructions possibles pour former l'approximation finale $v_{i+\frac{1}{2}}$:

$$v_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r v_{i+\frac{1}{2}}^r$$

avec

$$\omega_r \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{r=0}^{k-1} \omega_r = 1$$

En pratique les poids barycentriques ω_r sont choisis de sorte à minimiser l'influence des reconstructions obtenues sur un stencil contenant une discontinuité. Ainsi,

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{n=0}^{k-1} \alpha_n} \quad \text{et} \quad \alpha_r = \frac{d_r}{(\varepsilon + \beta_r)^2}$$

où β_r est une mesure de la raideur de la solution, ε une constante positive évitant une division par 0, et d_r les poids pour une reconstruction régulière sur tous les stencils telle que :

$$v_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r v_{i+\frac{1}{2}}^r = v(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^{2k-1})$$

Soit pour $k = 3$:

$$d_0 = \frac{3}{10} \quad d_1 = \frac{3}{5} \quad d_2 = \frac{1}{10}$$

De nombreux tests numériques ont conduit à la formulation suivante des β_r pour $k = 3$:

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_i - 2\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{v}_i - 4\bar{v}_{i+1} + \bar{v}_{i+2})^2 \\ \beta_1 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_{i-1} - 2\bar{v}_i + \bar{v}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\bar{v}_{i-1} - \bar{v}_{i+1})^2 \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(\bar{v}_{i-2} - 2\bar{v}_{i-1} + \bar{v}_i)^2 + \frac{1}{4}(\bar{v}_{i-2} - 4\bar{v}_{i-1} + 3\bar{v}_i)^2 \end{aligned}$$

La méthode WENO permet d'obtenir au final une reconstruction d'ordre $2k - 1$. On notera que les stencils utilisés sont décalés et applicables au cas où le vent souffle de la gauche vers la droite. Si le vent souffle dans l'autre sens, la procédure est modifiée de manière symétrique par rapport à $x_{i+\frac{1}{2}}$. Ainsi pour une cellule I_i donnée, on obtiendra les reconstructions à gauche et à droite notées respectivement $v_{i+\frac{1}{2}}^-$ et $v_{i-\frac{1}{2}}^+$.

B.2 Lois de conservation

L'application de la méthode WENO aux lois de conservation hyperboliques est présentée dans le cas monodimensionnel. L'extension aux dimensions supérieures est immédiate, il suffit d'appliquer indépendamment la méthode dans chaque direction.

On ne considère que la formulation par différences finies, plus économique que celle par volumes finis mais qui nécessite un maillage uniforme.

B.2.1 Flux scalaire

On considère la loi de conservation scalaire :

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0$$

munie de conditions initiale et limite adaptées.

La formulation conservative de la dérivée spatiale conduit à la résolution de :

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}} \right)$$

où $u_i(t) = u(x_i, t)$ et le flux numérique $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}$ est obtenu par la procédure WENO. Pour assurer la stabilité de la méthode Shu recommande d'utiliser des flux upwind. On décompose donc f en deux parties (flux splitting) :

$$f(u) = f^+(u) + f^-(u)$$

avec

$$\frac{df^+(u)}{du} \geq 0 \quad \text{et} \quad \frac{df^-(u)}{du} \leq 0$$

La décomposition de Lax-Friedrichs est retenue pour sa simplicité :

$$f^\pm(u) = \frac{1}{2}(f(u) \pm \alpha u) \quad \text{où} \quad \alpha = \max_u |f'(u)|$$

Pour f^+ le vent souffle de la gauche vers la droite. Si $\bar{v}_i = f^+(u_i)$ on aura alors $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^+ = v_{i+\frac{1}{2}}^-$. Inversement, si $\bar{v}_i = f^-(u_i)$ alors $\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^- = v_{i+\frac{1}{2}}^+$, et le flux numérique final est simplement :

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} = \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \hat{f}_{i+\frac{1}{2}}^-$$

B.2.2 Flux vectoriel

On s'intéresse maintenant au cas d'un système vectoriel hyperbolique de taille m :

$$\frac{\partial \vec{u}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{f}(\vec{u})}{\partial x} = \vec{0}$$

Il existe plusieurs manières de généraliser la méthode WENO aux systèmes. La plus simple consiste à appliquer directement la reconstruction composante par composante. En pratique cependant, cette méthode s'avère limitée aux faibles ordres 2 ou 3, au-delà des signes d'oscillations peuvent apparaître. Shu propose de renforcer la robustesse du schéma en utilisant la décomposition caractéristique.

Le système étant hyperbolique, la matrice jacobienne A possède m valeurs propres réelles :

$$\lambda_1(\vec{u}) \leq \dots \leq \lambda_m(\vec{u})$$

et m vecteurs propres à droite $\vec{r}_1(\vec{u}), \dots, \vec{r}_m(\vec{u})$. On peut alors former la matrice de passage R dont les colonnes sont les \vec{r}_i et obtenir la matrice diagonale des valeurs propres :

$$\Lambda(\vec{u}) = R^{-1}(\vec{u})A(\vec{u})R(\vec{u})$$

La reconstruction caractéristique au noeud $x_{i+\frac{1}{2}}$ peut se résumer de la manière suivante :

1. On calcule l'état moyen $\vec{u}_{i+\frac{1}{2}}$ par la simple relation :

$$\vec{u}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\vec{u}_i + \vec{u}_{i+1})$$

2. On forme les matrices de passage R et R^{-1} au point $x_{i+\frac{1}{2}}$:

$$R = R(\vec{u}_{i+\frac{1}{2}}) \quad R^{-1} = R^{-1}(\vec{u}_{i+\frac{1}{2}}) \quad \Lambda = \Lambda(\vec{u}_{i+\frac{1}{2}})$$

3. Pour j dans un voisinage de i on suppose que R , R^{-1} et Λ sont constantes. On forme alors les vecteurs et flux caractéristiques :

$$\vec{v}_j = R^{-1} \vec{u}_j \quad \vec{g}_j = R^{-1} \vec{f}(\vec{u}_j) \quad j \text{ dans un voisinage de } i$$

4. On effectue la reconstruction WENO scalaire sur chaque composante du nouveau système valable uniquement dans un voisinage de i :

$$\frac{\partial \vec{v}(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \vec{g}}{\partial x} = 0$$

5. On repasse ensuite dans la base de départ :

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm} = R \vec{g}_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}$$

et on forme le flux numérique :

$$\vec{f}_{i+\frac{1}{2}} = \vec{f}_{i+\frac{1}{2}}^+ + \vec{f}_{i+\frac{1}{2}}^-$$

Annexe C

Cluster Beowulf

C.1 Historique

Le premier cluster de PC fut conçu en 1994 au centre Vol Spatial Goddard de la NASA. Pour ses activités liées à la science de la Terre et au domaine spatial, l'agence américaine avait besoin d'une machine capable de fournir une puissance d'un gigaflops (un milliard d'opérations en virgule flottante par seconde) au moindre coût. Deux chercheurs, Thomas Sterling et Don Becker, décidèrent d'utiliser les produits issus de l'industrie informatique de masse afin de construire leur machine de calcul. Le premier cluster de PC, basé sur 16 machines de type DX4 reliées par un réseau Ethernet, fut baptisé Beowulf en référence au héros mythologique du même nom [102]. Depuis, le succès de ce type de machine ne s'est pas démenti et de nombreuses équipes de recherche commencent à se tourner vers cette plateforme pour leurs besoins de calculs locaux.

C.2 Philosophie

Conformément à l'idée originale, la philosophie du projet Beowulf (www.beowulf.org) est d'utiliser les avancées techniques de l'industrie informatique grand public pour construire une machine. A cela s'ajoute le développement et l'utilisation de logiciels libres tels Linux. En pratique les clusters de PC sont des machines parallèles à mémoire distribuée qui se situent entre les machines massivement parallèles (e.g. Cray T3E) et les réseaux de stations. Du fait de l'important temps de latence du réseau d'un cluster Beowulf, seules les applications ne nécessitant pas des échanges d'information fréquents (grain moyen ou gros) peuvent être envisagées sur cette architecture.

C.3 Le cluster EPEE

Le cluster utilisé dans le cadre de cette thèse, et sur lequel est porté le code WENO, est constitué de 24 noeuds de calcul identiques et d'un noeud maître (fig. C.1) :

- processeur Intel PIII 800 Mhz,
- 256 Mo de RAM,
- disque dur de 20 Go,
- carte réseau Fast Ethernet.

L'ensemble utilise le système Linux, les bibliothèques d'échange de messages sont MPI et PVM.

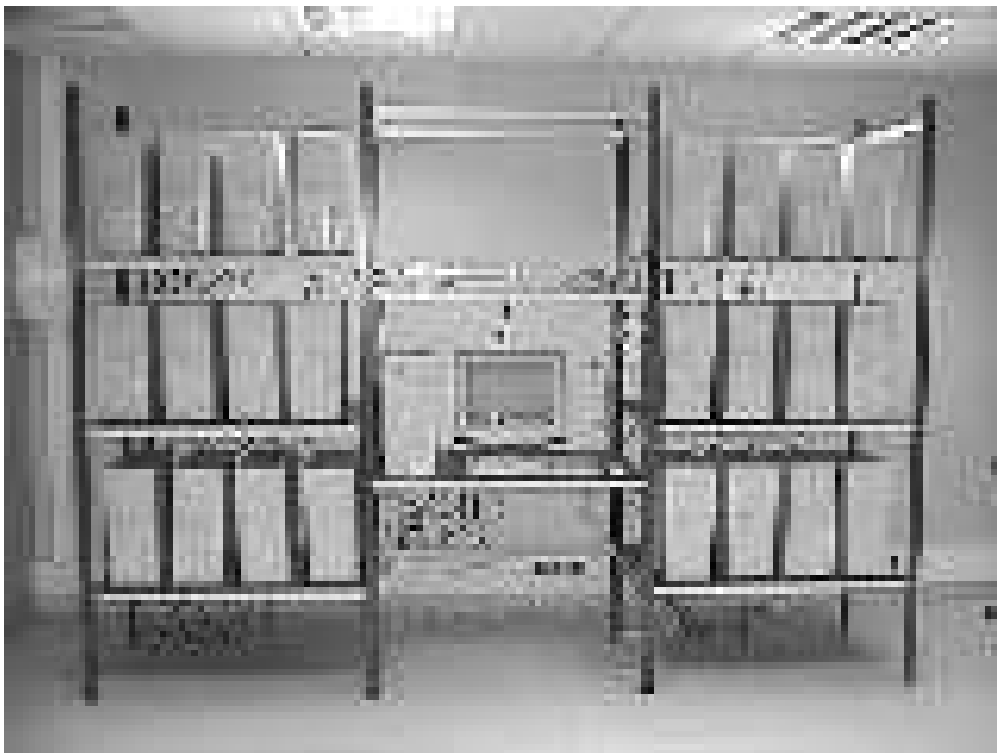


FIG. C.1 – Cluster EPEE utilisé pour les calculs WENO

Annexe D

Similitude spatiale

La recherche d'une solution en similitude pour la couche de mélange compressible binaire en développement spatial ne constitue qu'une simple extension des études mono-espèces classiques [114]. On rappelle ici le principe de cette approche ainsi que la méthode de résolution employée en se basant sur les travaux de [47]. Les résultats présentés mettent en évidence la forte dissymétrie des profils lorsque les rapports de densité ou de vitesse sont grands.

D.1 Configuration et paramètres

On s'intéresse à la région lointaine de la couche de mélange, représentée schématiquement en figure (D.1).

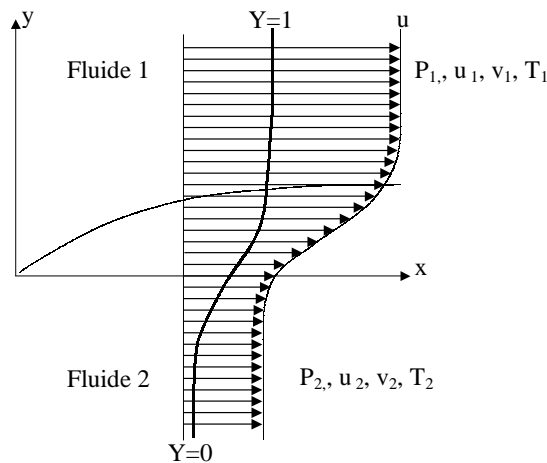


FIG. D.1 – Représentation schématique des paramètres de la couche de mélange en similitude

Les hypothèses classiques de couche mince sont appliquées aux équations de Navier-Stokes (1.8)–(1.11), à savoir :

- écoulement plan
- écoulement stationnaire
- $v \ll u$
- $\partial/\partial x \ll \partial/\partial y$
- $Re \gg 1$

pour aboutir au système asymptotique :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (\text{D.1})$$

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (\text{D.2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (\text{D.3})$$

$$\begin{aligned} \rho \overline{Cp} \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= u \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu \overline{Cp}}{\text{Pr}} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \\ &+ (Cp_1 - Cp_2) \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

$$\rho \left(u \frac{\partial Y}{\partial x} + v \frac{\partial Y}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial y} \right) \quad (\text{D.5})$$

D.2 Principe d'affinité

Les équations (D.1)–(D.5) dépendent des variables d'espace x et y . Le principe d'affinité consiste à définir des transformations telles que sous certaines conditions mathématiques les solutions ne dépendent plus que de l'intégration d'un système d'équations différentielles ordinaires à une seule variable [64].

Le point de départ de la méthode consiste à remplacer l'équation de continuité par un système écrit à l'aide des dérivées partielles de la fonction de courant ψ .

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\rho v \quad (\text{D.6})$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \rho u \quad (\text{D.7})$$

En écoulement incompressible, celle-ci s'écrit :

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = U(x, y) u_e(x) \quad (\text{D.8})$$

avec $U(x, y) = u(x, y)/u_e(x)$, $u_e(x)$ étant la vitesse extérieure à définir. Dans le cas compressible, on introduit par analogie avec (D.8) deux nouvelles variables ξ et η telles que :

$$\frac{\partial \psi}{\partial \eta} = U(\xi, \eta) F(\xi)$$

et,

$$\xi = \xi(x) \quad \eta = \eta(x, y)$$

Soit,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (\text{D.9})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \eta}{\partial y} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (\text{D.10})$$

Ainsi, (D.10) et (D.7) donnent :

$$\eta = \frac{u_e(\xi)}{F(\xi)} \int_{-\infty}^y \rho dy' \quad (\text{D.11})$$

Le découplage des variables :

$$u(\xi, \eta) = u_e(\xi) \cdot f'(\eta) \quad (\text{D.12})$$

$$\rho(\xi, \eta) = \rho_e(\xi) \cdot g'(\eta) \quad (\text{D.13})$$

$$T(\xi, \eta) = T_e(\xi) \cdot \theta(\eta) \quad (\text{D.14})$$

$$Y(\xi, \eta) = Y(\eta) \quad (\text{D.15})$$

associé à la condition issue de l'équation de quantité de mouvement selon x (D.2), conduit à poser :

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \rho_e \mu_e u_e \quad (\text{D.16})$$

et impose comme condition d'existence de la solution en similitude que :

$$F \frac{\partial F}{\partial \xi} = 1 \quad (\text{D.17})$$

Une dernière hypothèse simplificatrice, et non restrictive pour le cas étudié, est de considérer que les grandeurs extérieures, indicées "e", sont constantes (indépendantes de la position d'abscisse) et relatives au fluide supérieur. D'où, pour les grandeurs physiques (D.12)–(D.15) :

$$u(\xi, \eta) = u_1 \cdot f'(\eta) \quad (\text{D.18})$$

$$\rho(\xi, \eta) = \rho_1 \cdot g'(\eta) \quad (\text{D.19})$$

$$T(\xi, \eta) = T_1 \cdot \theta(\eta) \quad (\text{D.20})$$

$$Y(\xi, \eta) = Y(\eta) \quad (\text{D.21})$$

En injectant (D.16), (D.17), (D.18)–(D.21) dans (D.2), (D.4), et (D.5) on aboutit au système final d'équations à résoudre :

$$[C f'']' + f f'' = 0 \quad (\text{D.22})$$

$$\left[C \frac{\overline{Cp}}{Sc} \theta' \right]' + \left((Cp_1 - Cp_2) \frac{C}{Sc} Y' + \overline{Cp} f \right) \theta' + C \frac{u_1^2}{T_1} f''^2 = 0 \quad (\text{D.23})$$

$$\left[\frac{C}{Sc} Y' \right]' + f Y' = 0 \quad (\text{D.24})$$

où $C = \frac{\rho \mu}{\rho_1 \mu_1} = \frac{\mu}{\mu_1} g'$ est le paramètre de Chapmann-Rubésin. (D.22) est issue de l'équation de quantité de mouvement selon x (D.2), (D.23) de l'équation de l'énergie sous forme enthalpique (D.4), et (D.24) de l'équation de conservation des espèces (D.5). L'équation d'état est également exprimée en variables de similitude :

$$P = \rho_1 T_1 (r_2 + (r_1 - r_2) Y) g' \theta \quad (\text{D.25})$$

D.3 Conditions aux limites

La résolution du système (D.22)–(D.25) nécessite d'imposer 3 conditions pour (D.22), 2 pour (D.23) et 2 pour (D.24), soit au total 7 conditions aux limites. On peut en obtenir 6 directement à partir des conditions à l'infini illustrées en figure (D.1).

En $\eta \rightarrow -\infty$:

$$f' \rightarrow \beta_u = u_2/u_1 \quad (\text{D.26})$$

$$Y \rightarrow 0 \quad (\text{D.27})$$

$$\theta \rightarrow \beta_T = T_2/T_1 \quad (\text{D.28})$$

En $\eta \rightarrow +\infty$:

$$f' \rightarrow 1 \quad (\text{D.29})$$

$$Y \rightarrow 1 \quad (\text{D.30})$$

$$\theta \rightarrow 1 \quad (\text{D.31})$$

L'obtention de la dernière condition est plus délicate et fait référence au problème de la "troisième condition". Kennedy et Gatski [47] effectuent une revue quasi exhaustive des approches classiques de fermeture. Ils rappellent que cette condition mathématique doit s'appuyer sur des concepts physiques afin de ne pas dénaturer la solution du problème. Ainsi, imposer simplement la valeur de f en $\eta = 0$ n'est pas correct (physiquement) car cela revient à fixer arbitrairement la position transversale à laquelle la vitesse v change de signe. Les travaux de Ting [106], basés sur des développements asymptotiques raccordés des équations de la couche limite, ont montré que la condition de Von Kármán est acceptable. Elle consiste à traduire mathématiquement l'annulation de la force transversale s'exerçant sur la couche de mélange.

D.4 Résolution numérique

La résolution numérique de ce problème aux limites est effectuée en pratique grâce à une méthode de tir. On intègre les équations (D.22)–(D.25) à l'aide d'un algorithme de Runge-Kutta à l'ordre 4 à partir des conditions (D.26)–(D.28) en $\eta \rightarrow -\infty$ pour satisfaire les conditions (D.29)–(D.31) en $\eta \rightarrow +\infty$.

En pratique, l'intégration numérique ne peut débuter seule car les conditions (D.26)–(D.28) imposent :

$$f''(-\infty) = 0$$

$$\theta'(-\infty) = 0$$

$$Y'(-\infty) = 0$$

Afin de débiter la résolution du système, on effectue un développement asymptotique de f , Y , et θ au voisinage de $\eta \rightarrow -\infty$. Pour cela on introduit une fonction Q [47] telle que :

$$Q'(-\infty) \rightarrow 0$$

$$Q''(-\infty) \rightarrow 0$$

Soit, au voisinage de $-\infty$:

$$\begin{aligned} f'' &= Q'_u & \theta' &= Q'_\theta & Y' &= Q'_Y \\ f' &= \beta_u + Q_u & \theta &= \beta_T + Q_\theta & Y &= Q_Y \\ f &= f_0 + \beta_u \eta + \int Q_u d\eta \end{aligned}$$

En injectant ces expressions dans les équations (D.22) – (D.25) et en négligeant les termes quadratiques en Q on obtient après intégration :

$$\begin{aligned} Q_u &= \alpha_u \left[\frac{1}{\eta + f_0/\beta_u} \cdot \exp \left(-\frac{\beta_u}{2C} (\eta + f_0/\beta_u)^2 \right) \right] \\ Q_\theta &= \alpha_\theta \left[\frac{1}{\eta + f_0/\beta_u} \cdot \exp \left(-\frac{\beta_u Pr}{2C} (\eta + f_0/\beta_u)^2 \right) \right] \\ Q_Y &= \alpha_Y \left[\frac{1}{\eta + f_0/\beta_u} \cdot \exp \left(-\frac{\beta_u Sc}{2C} (\eta + f_0/\beta_u)^2 \right) \right] \end{aligned}$$

Les paramètres de tir sont les constantes α_u , α_θ , α_Y , la "troisième condition" permet de fixer f_0 .

Le retour dans l'espace physique (x, y) est assuré par la transformation inverse :

$$x = \frac{\xi}{\rho_1 \mu_1 u_1} \quad ; \quad y = \frac{\sqrt{2\xi}}{u_1} \int_0^\eta \frac{1}{\rho} d\eta'$$

D.5 Résultats

A titre d'illustration on a considéré deux couples de fluides : N_2/O_2 et H_2/O_2 , associés à deux rapports de vitesse. Les quatre cas considérés sont détaillés en table D.1.

	u_1 (m/s)	u_2 (m/s)	T_1 (K)	T_2 (K)
cas 1	100	300	300	300
cas 2	100	1000	300	300

TAB. D.1 – Paramètres de calcul pour les couples N_2/O_2 et H_2/O_2

Les résultats présentés en figures (D.2) et (D.3) ont été obtenus en posant $f_0 = 0$ et sont donnés à une abscisse telle que le nombre de Reynolds, construit sur l'épaisseur de vortacité et les grandeurs de référence, vaille 100.

Ces figures montrent que l'effet de densité joue essentiellement sur les profils de densité, concentration et température. Plus le rapport de densité est grand, plus le profil de fraction massique d'oxygène est dissymétrique et ce, quasi-indépendamment du rapport de vitesse. Inversement, la forme du profil de vitesse longitudinale est principalement liée au rapport de vitesse, le rapport de densité n'ayant qu'une faible influence. Ceci suggère un découplage entre les effets dynamique et de transport de masse au sein de la couche de mélange spatiale en première approximation. La présence du paramètre de Chapman-Rubesin (figure D.4) dans l'équation de quantité de mouvement (D.22), bien que devant le terme de dérivation le plus élevé, semble donc anecdotique. Néanmoins, sans ce terme de couplage la solution construite serait moins proche d'une solution exacte du système de Navier-Stokes.

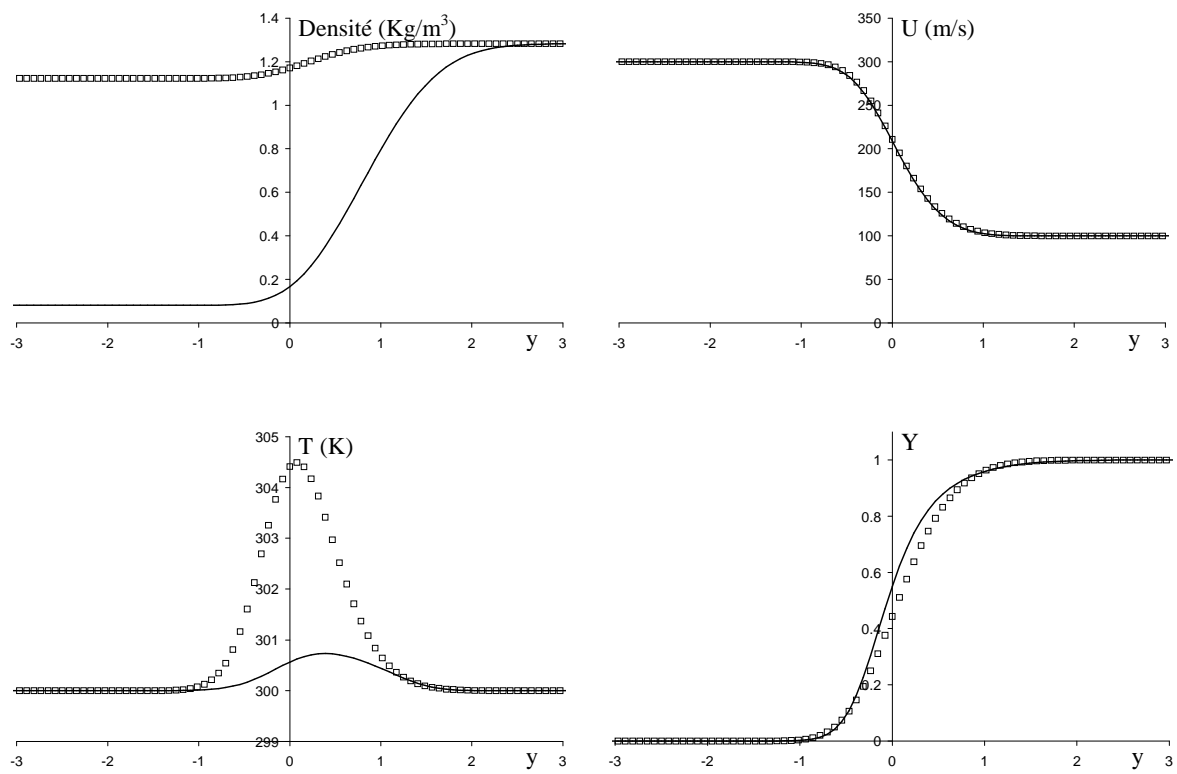


FIG. D.2 – Profils de la couche de mélange spatiale à $Re = 100$, pour les couples N_2/O_2 (carrés) et H_2/O_2 (ligne), $u_2 = 100m/s$ et $u_1 = 300m/s$

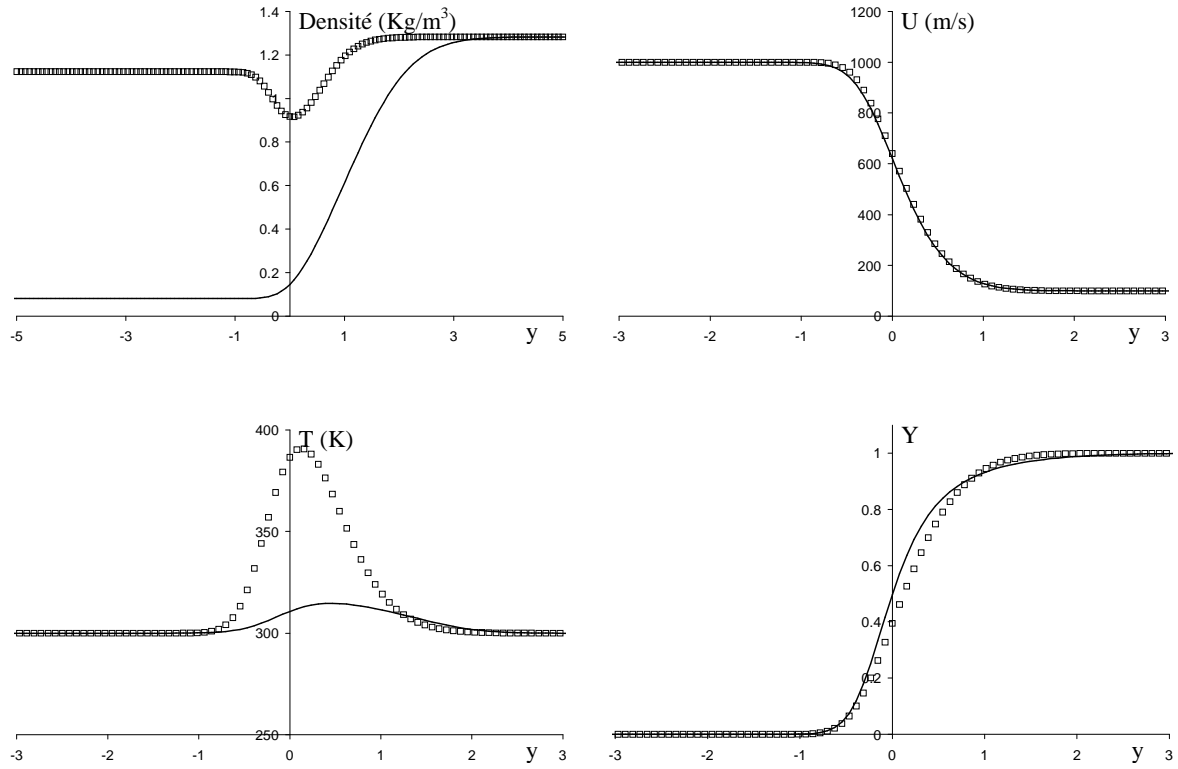


FIG. D.3 – Profils de la couche de mélange spatiale à $Re = 100$, pour les couples N_2/O_2 (carrés) et H_2/O_2 (ligne), $u_2 = 100\text{m/s}$ et $u_1 = 1000\text{m/s}$

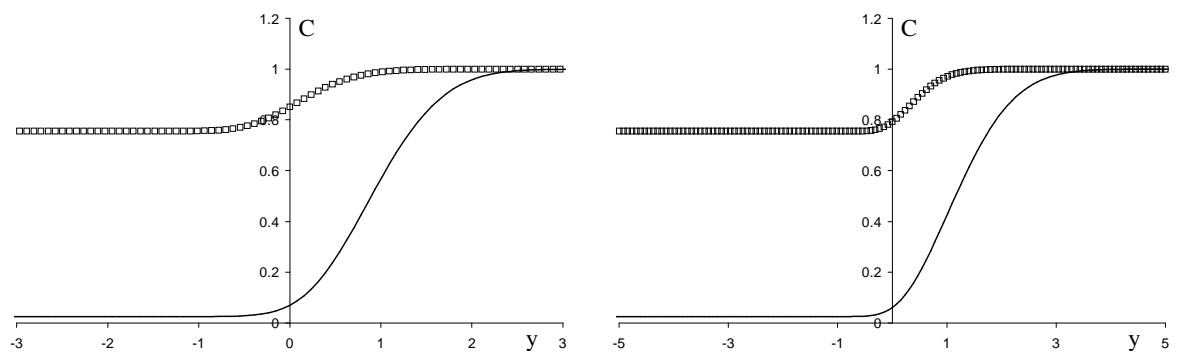


FIG. D.4 – Paramètre de Chapman-Rubensin de la couche de mélange spatiale à $Re = 100$, pour les couples N_2/O_2 (carrés) et H_2/O_2 (ligne)

Annexe E

Termes sous-maille

Dans cette annexe on donne les figures des champs statistiques ayant servi à évaluer l'intensité des termes sous-maille du chapitre 12. On présente d'abord le cas N_2/O_2 puis les résultats de H_2/O_2 . Les paramètres des différents cas sont détaillés en tables 12.1 et 12.2 respectivement.

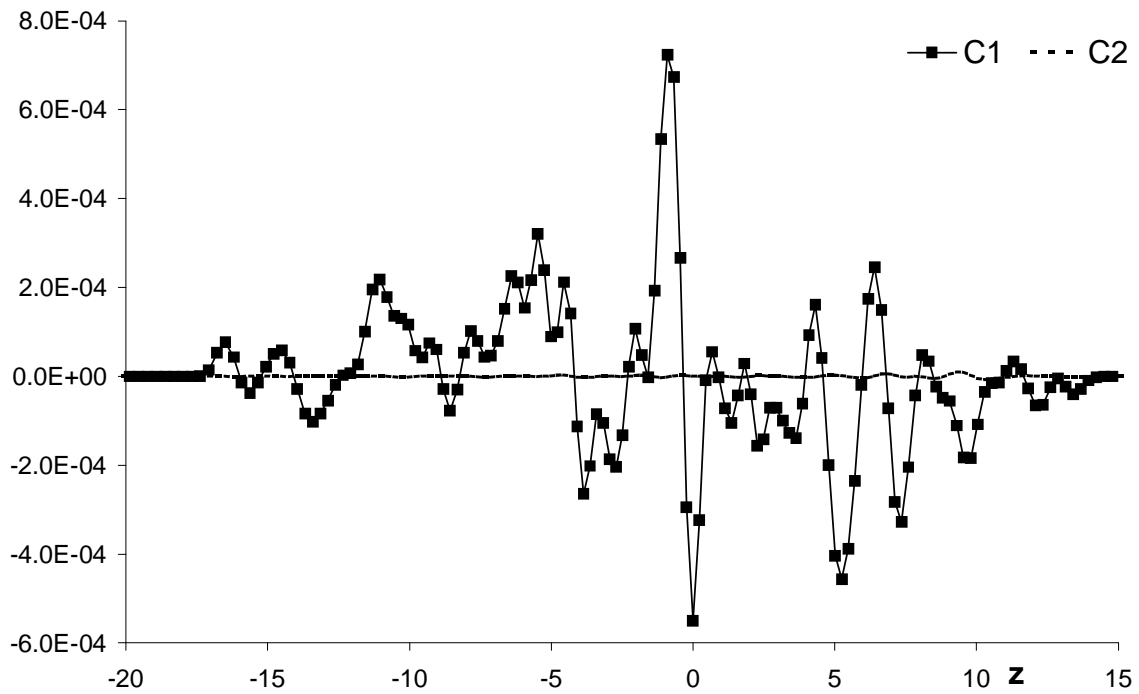
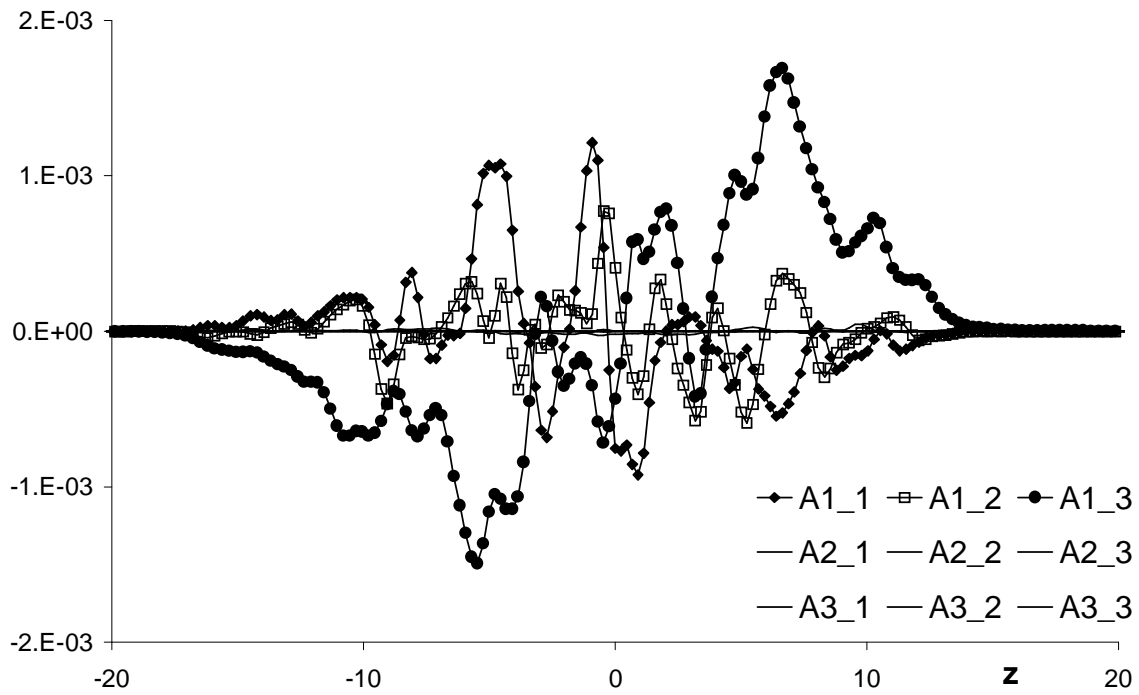


FIG. E.1 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #1.

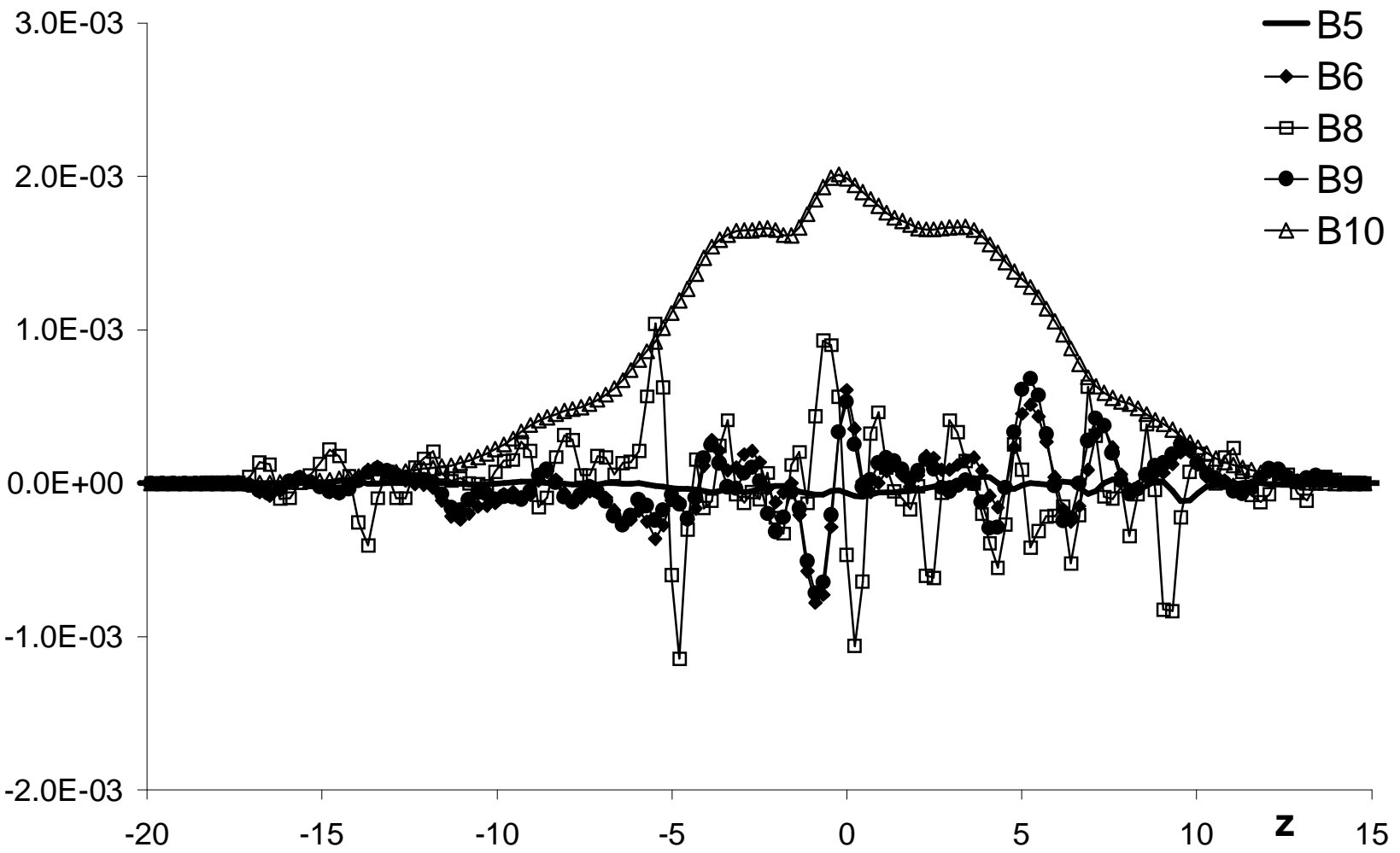


FIG. E.2 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #1.

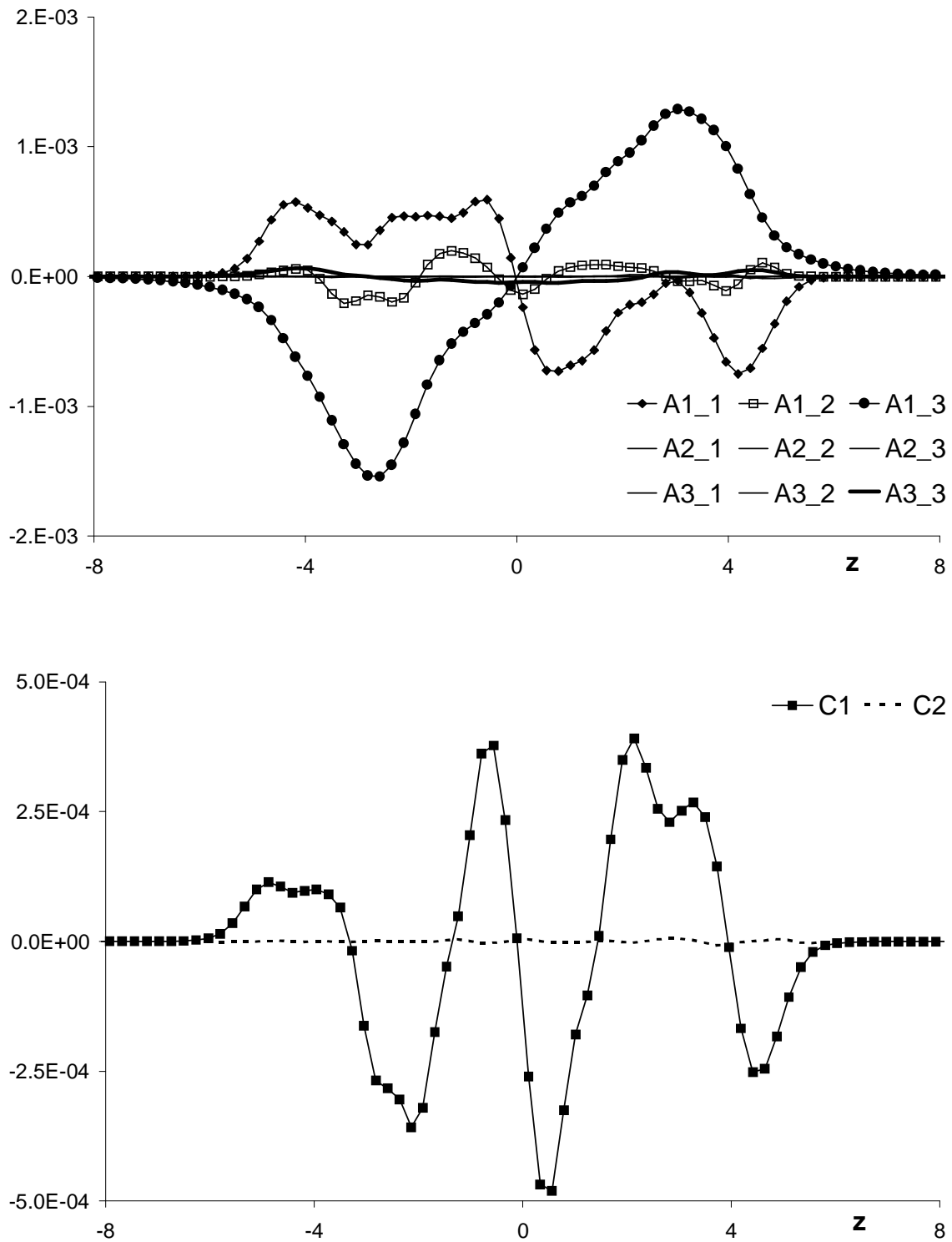


FIG. E.3 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #2.

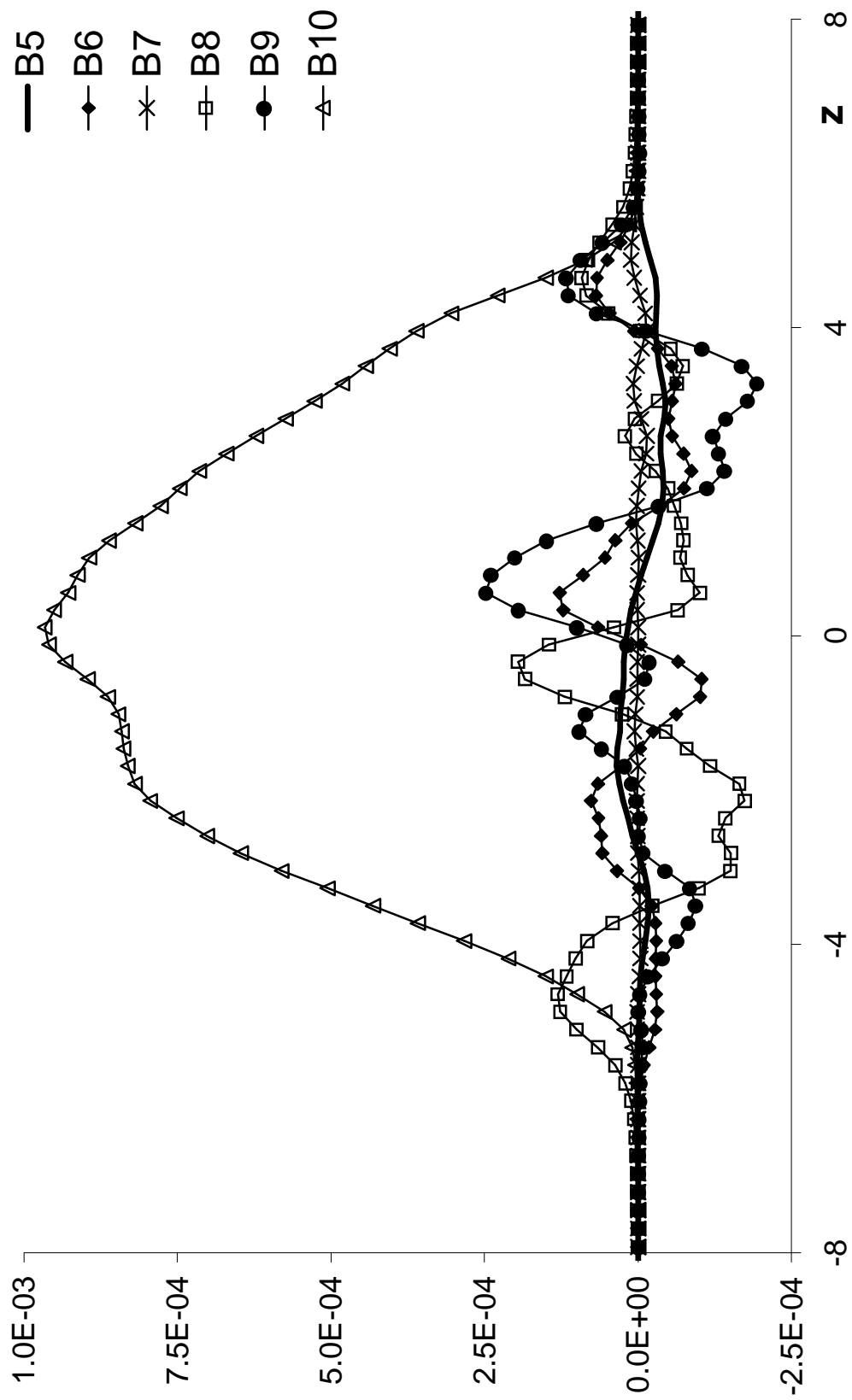


FIG. E.4 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #2.

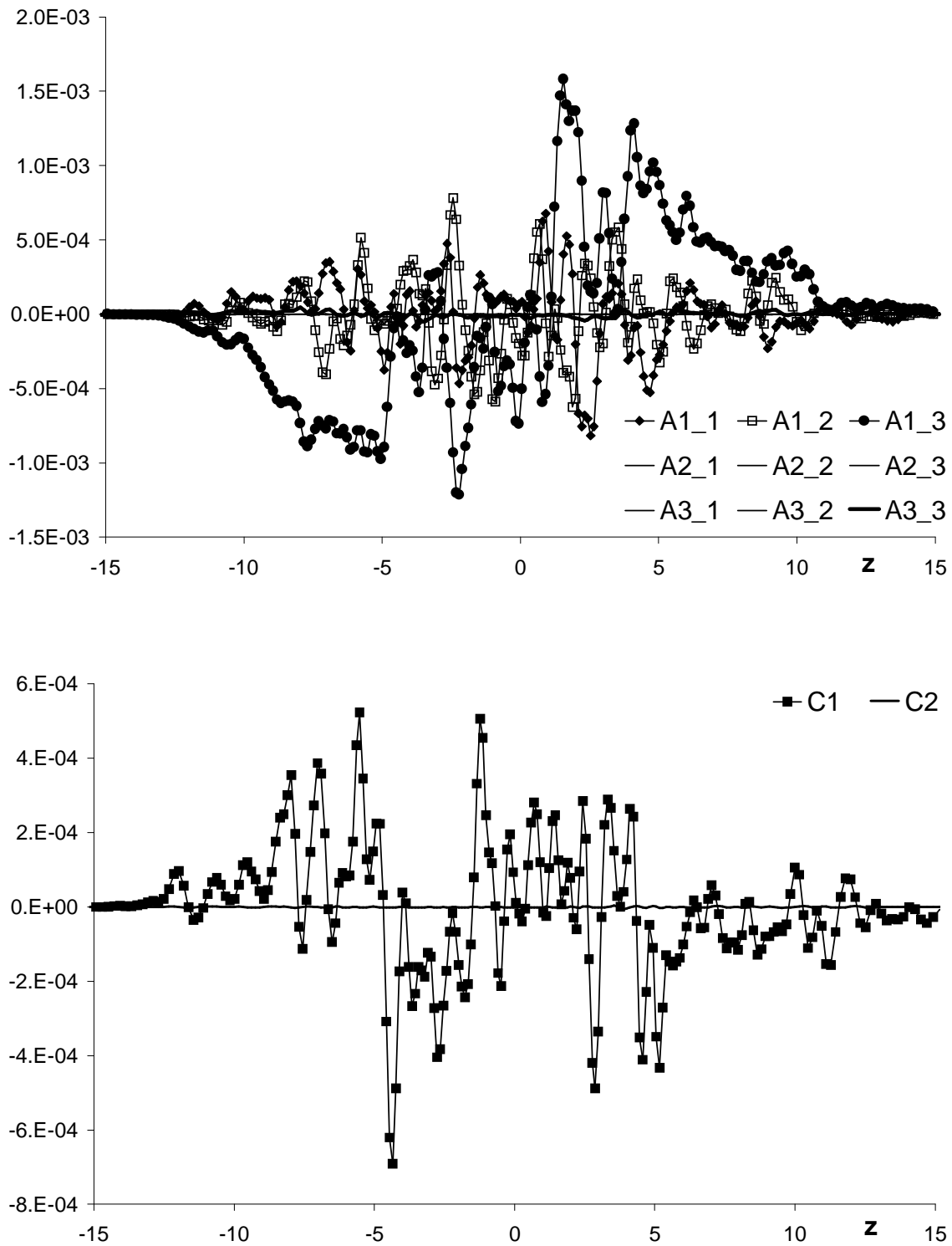
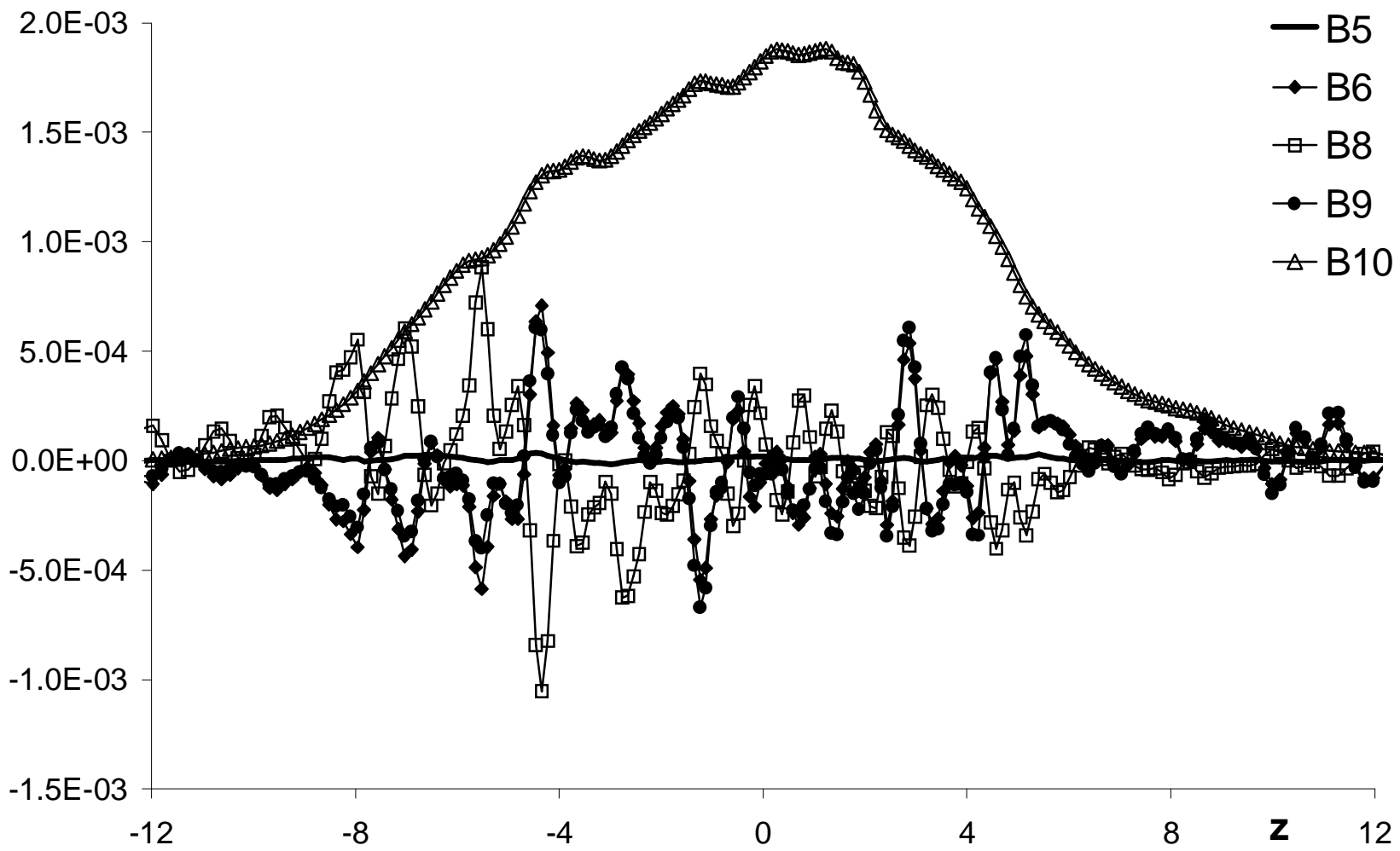


FIG. E.5 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #3.

FIG. E.6 – Termes sous-maître de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #3.



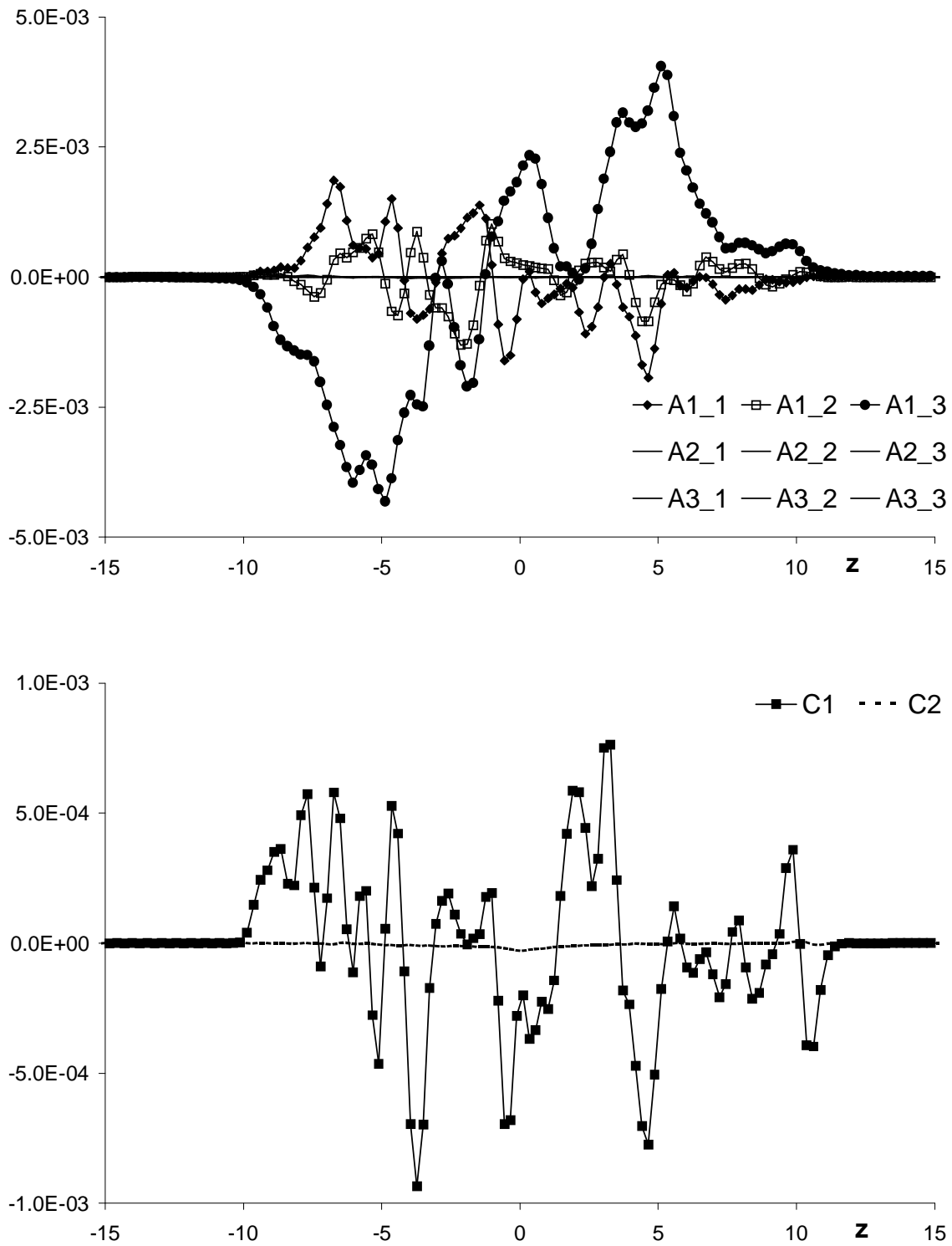


FIG. E.7 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #4.

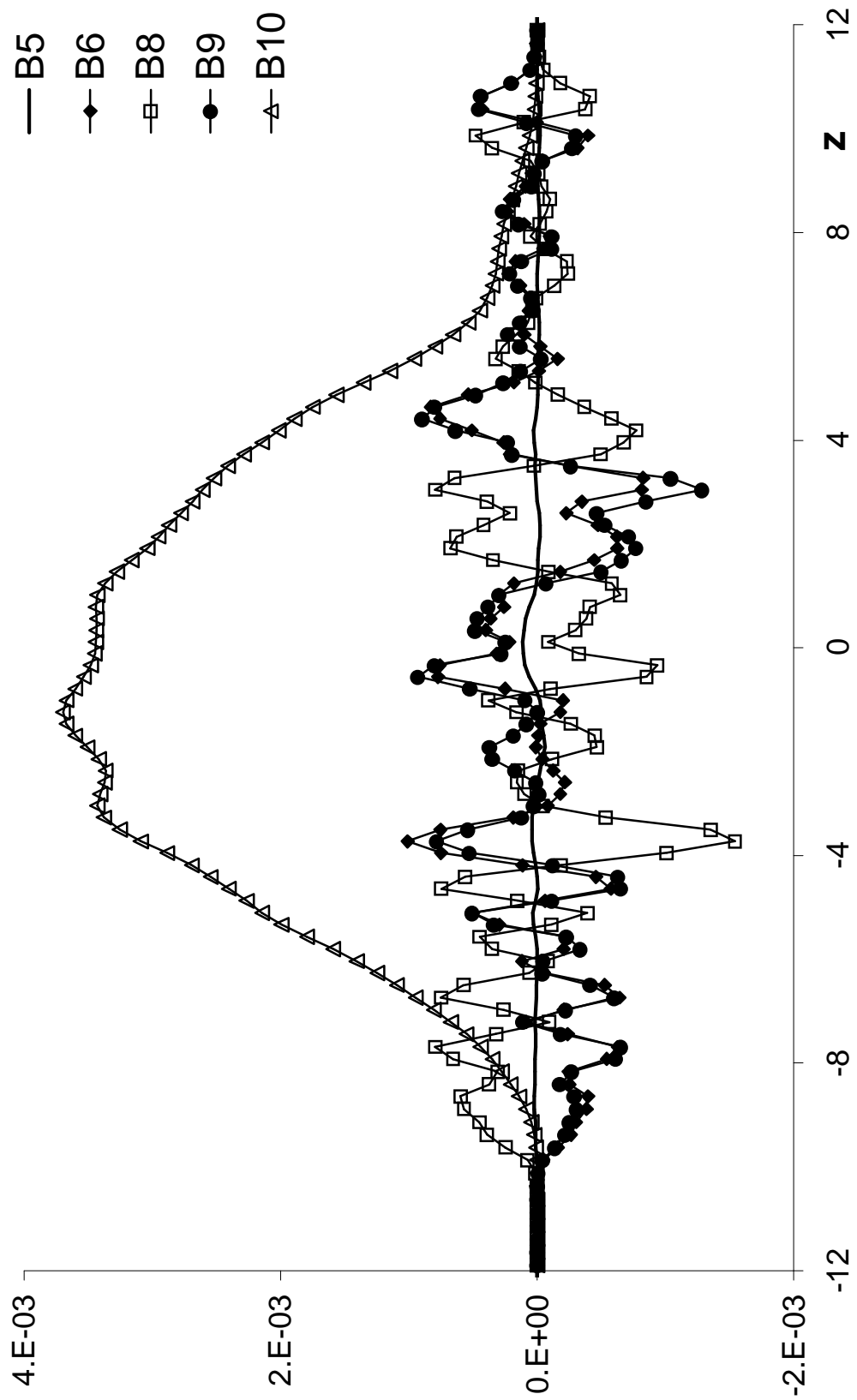


FIG. E.8 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #4.

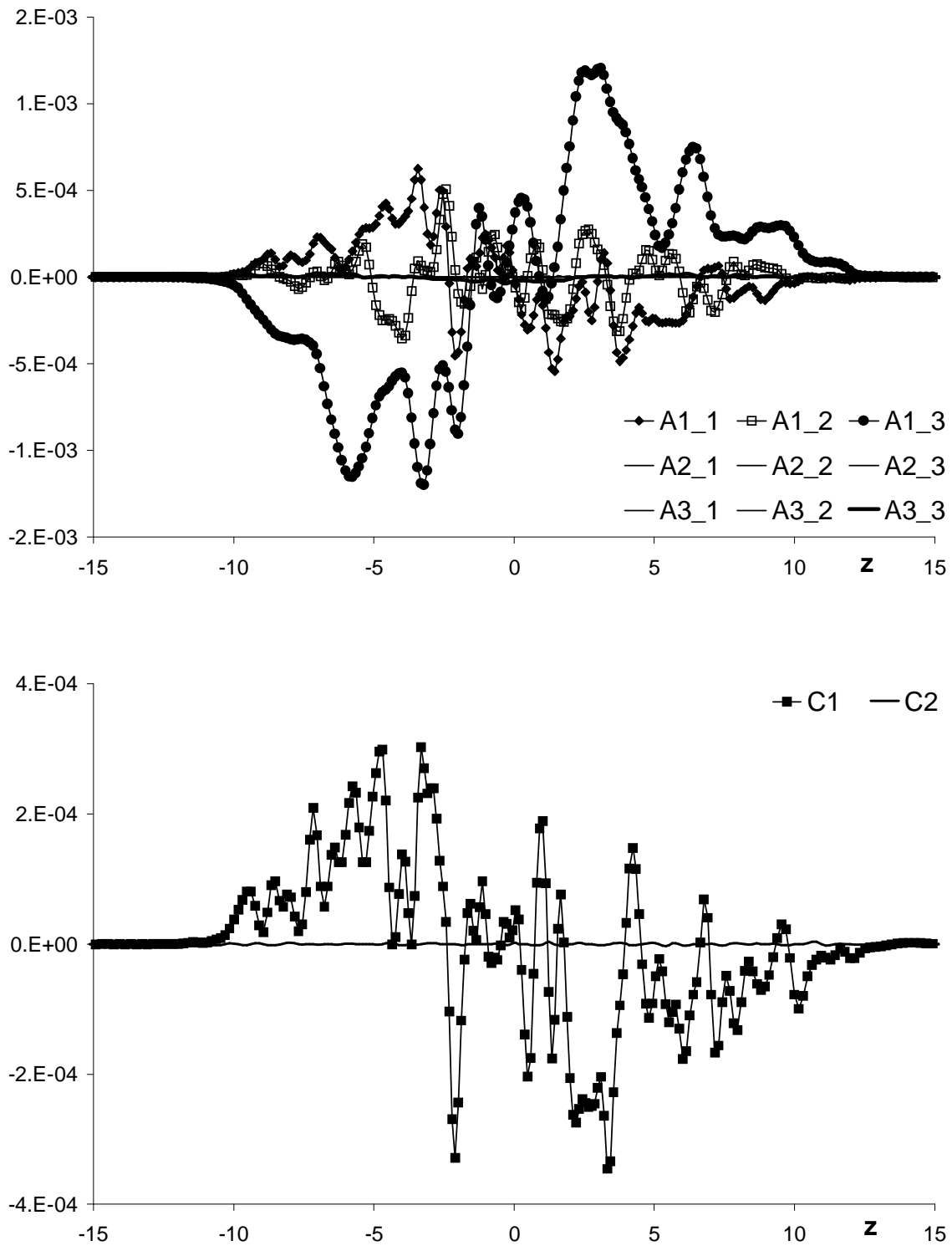


FIG. E.9 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #5.



FIG. E.10 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #5.

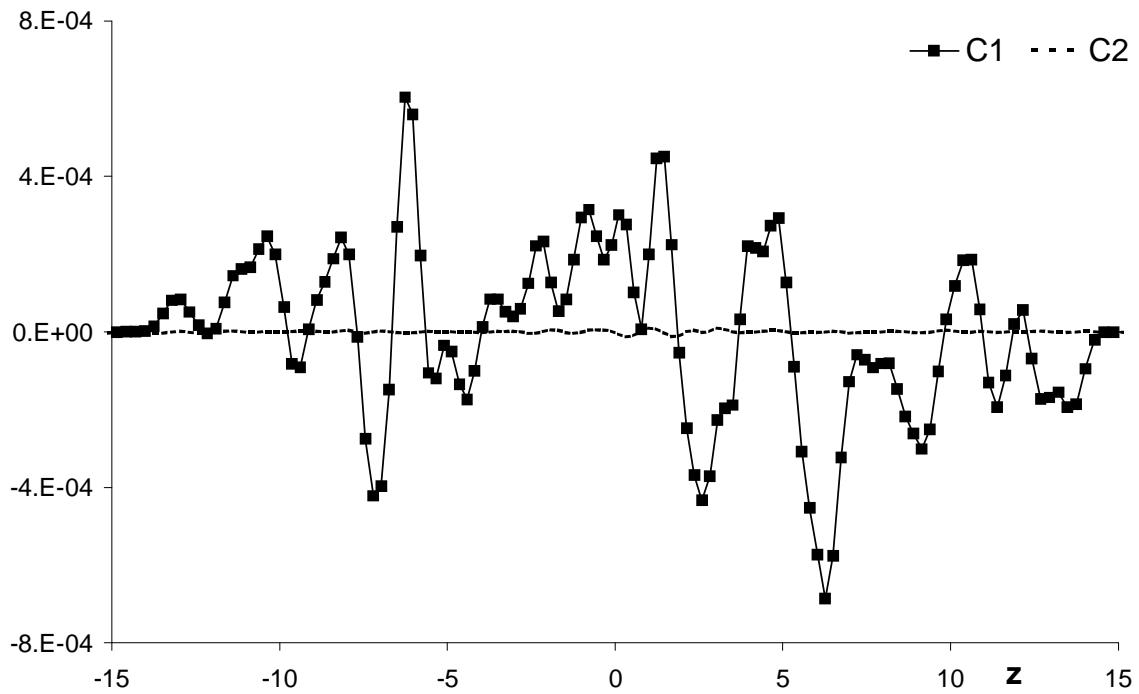
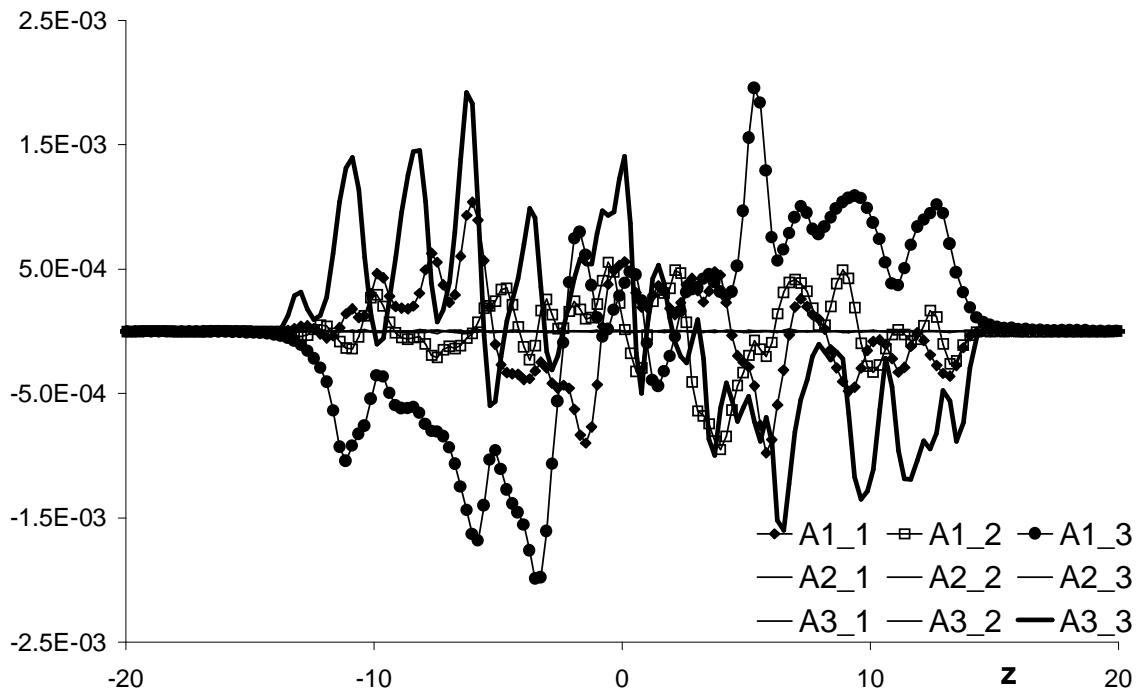


FIG. E.11 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas N_2/O_2 #6.

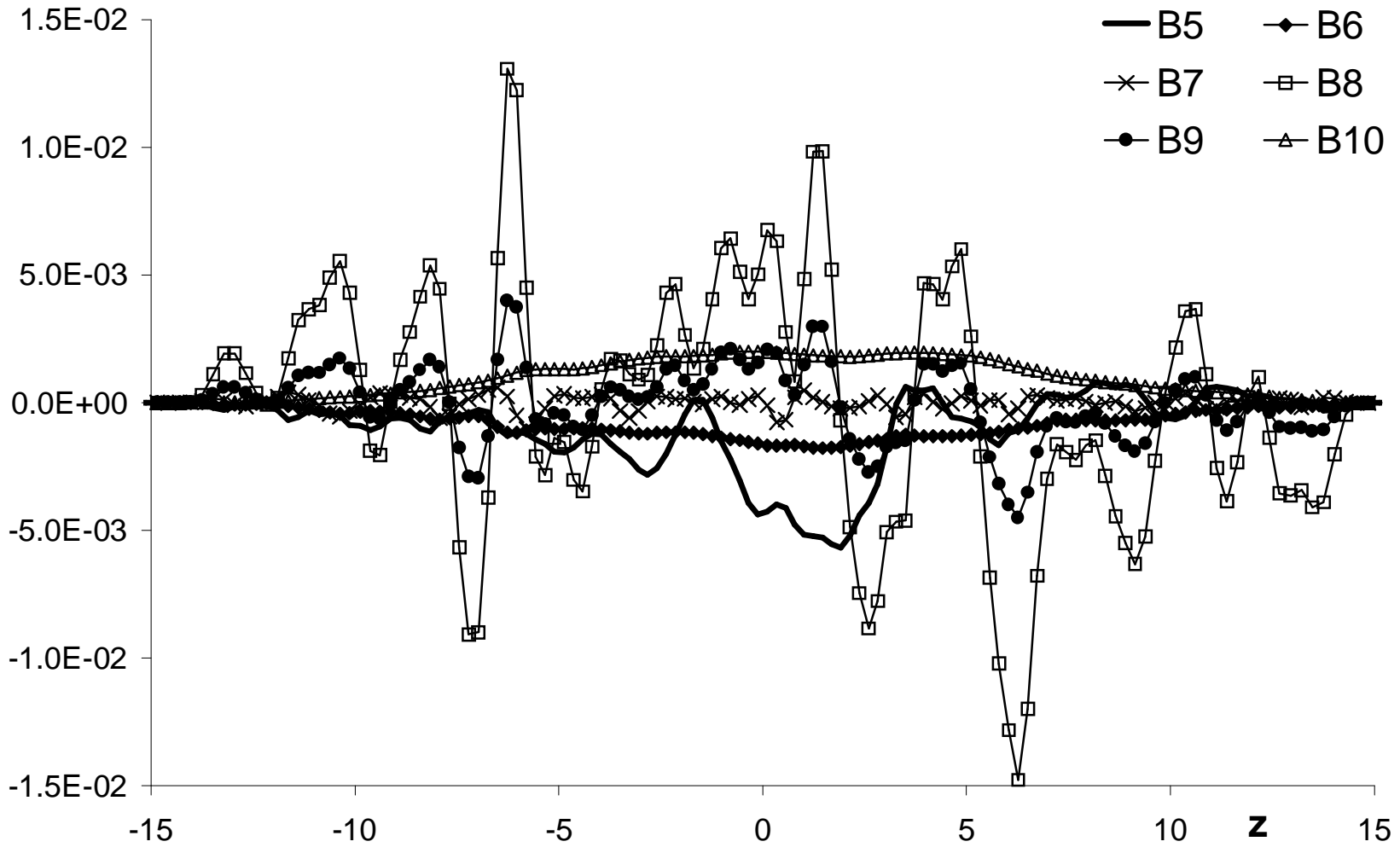


Fig. E.12 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas N_2/O_2 #6.

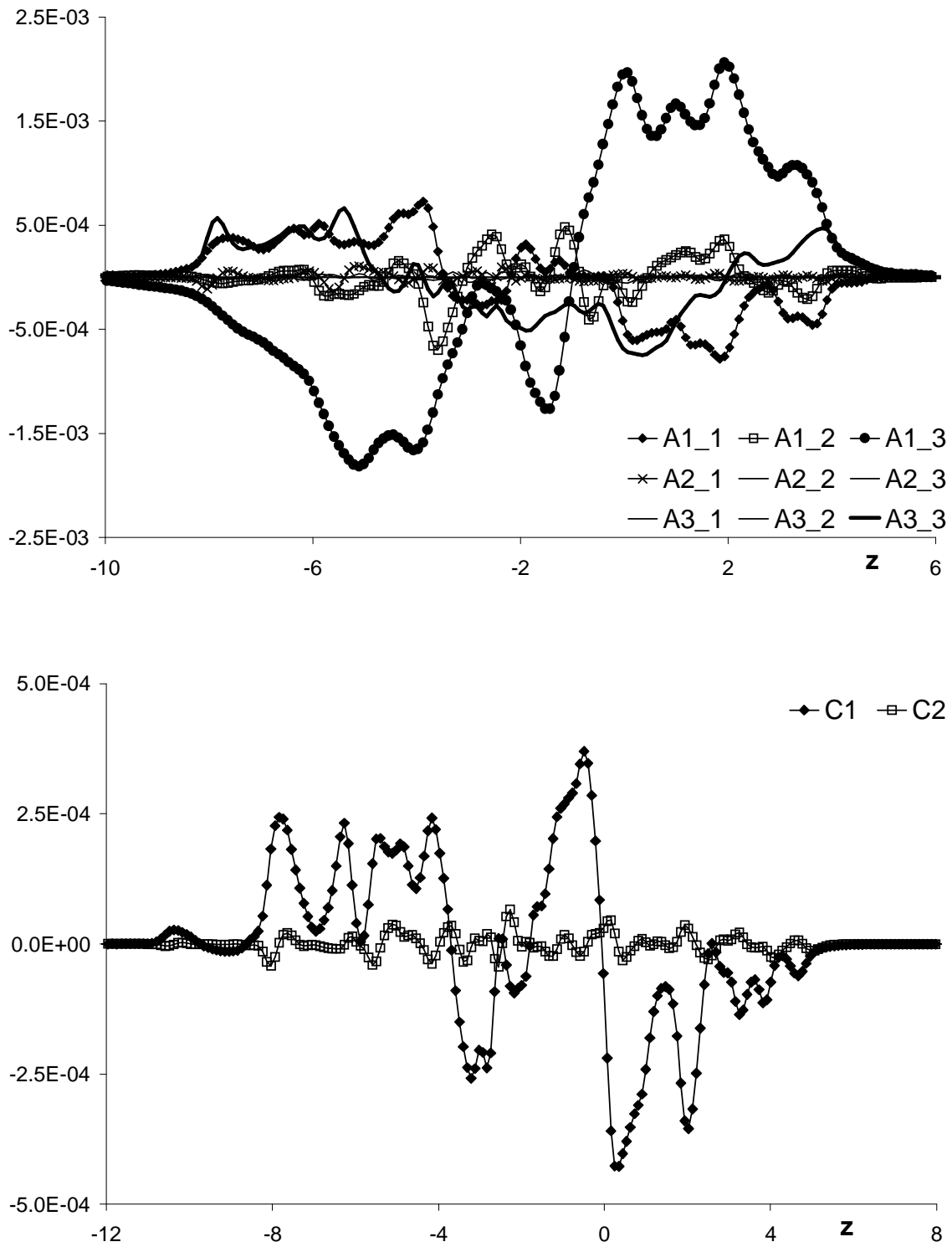


FIG. E.13 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas H_2/O_2 #1.

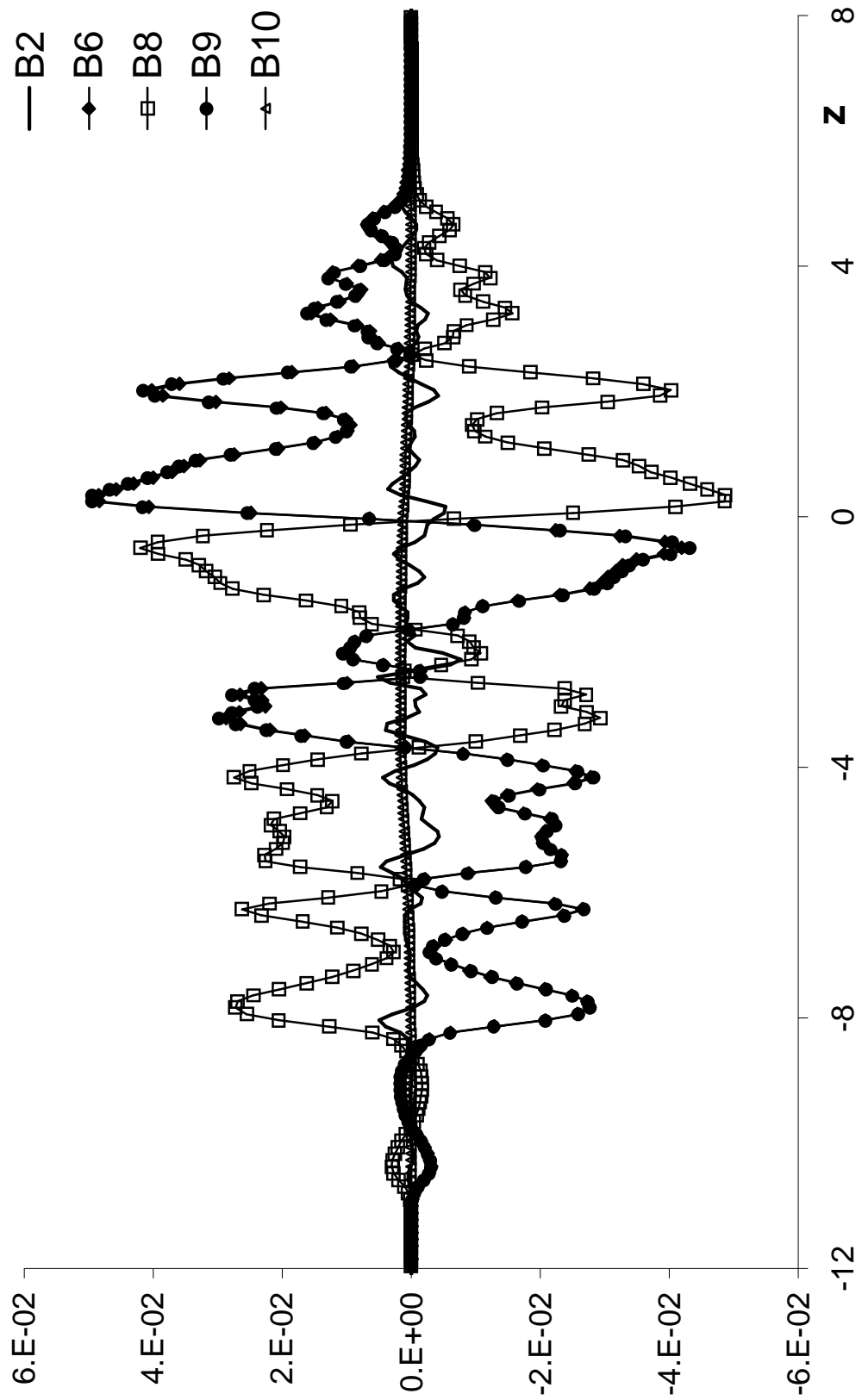


FIG. E.14 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas H_2/O_2 #1.

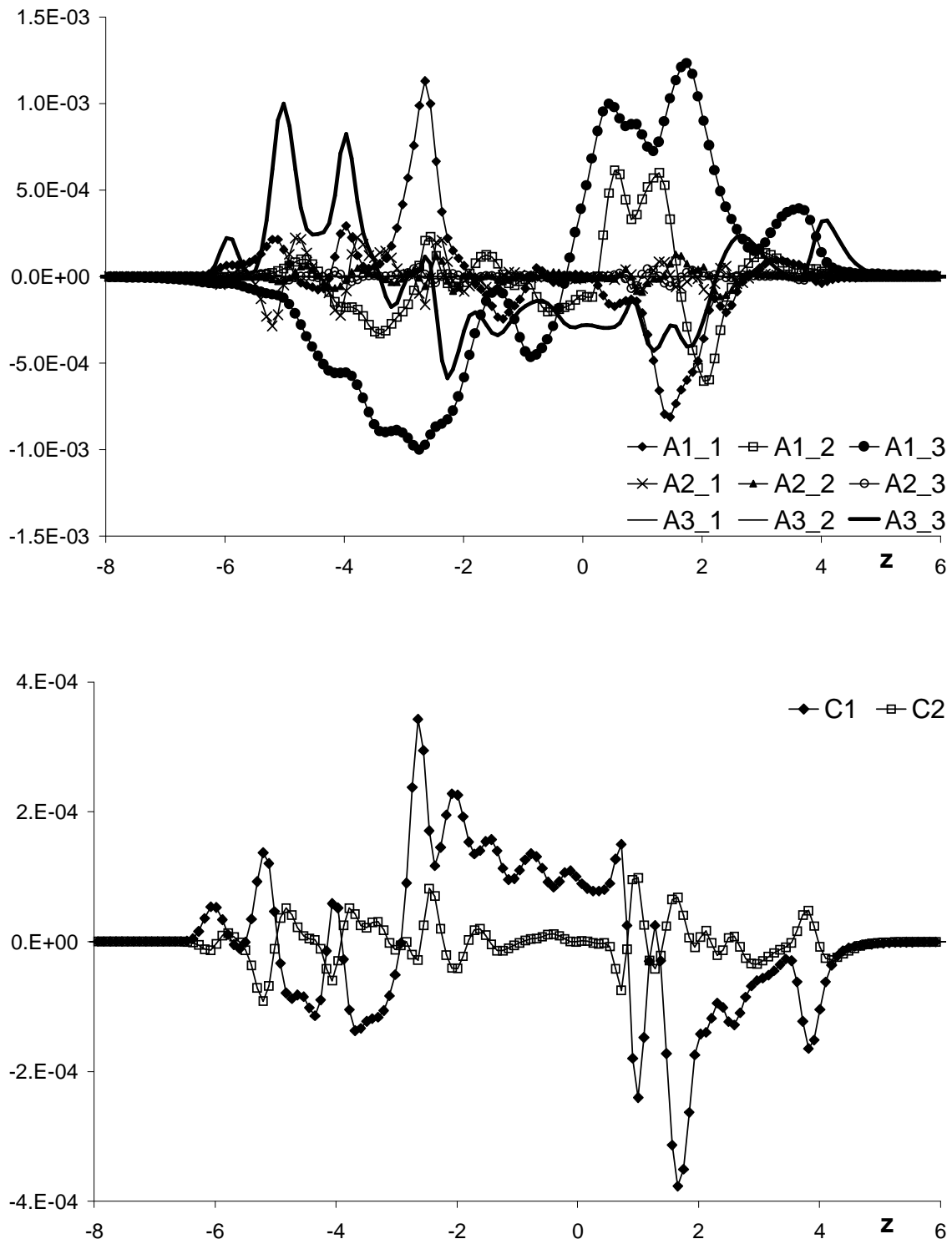


FIG. E.15 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas H_2/O_2 #2.

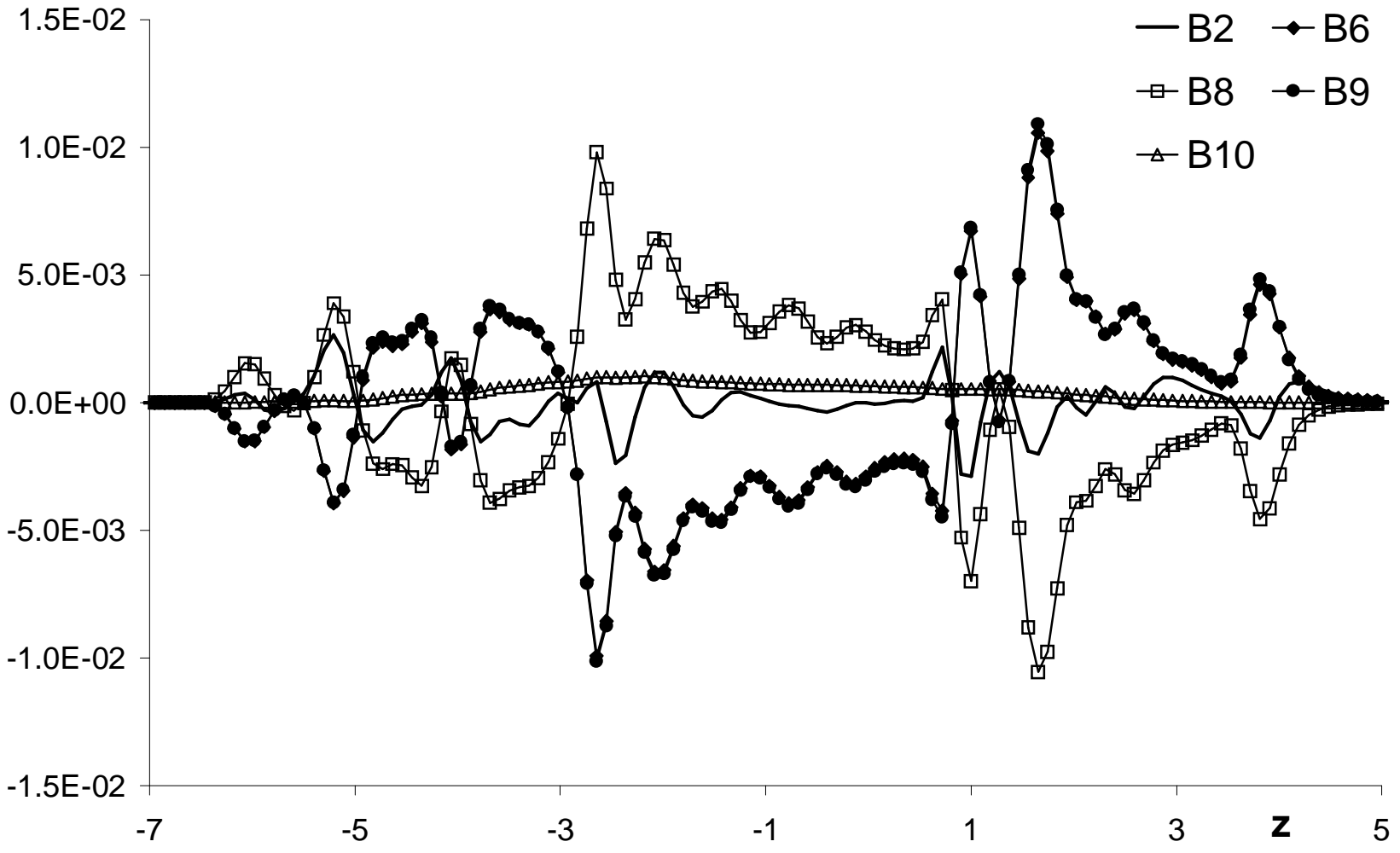


Fig. E.16 – Termes sous-maîle de l'équation de l'énergie pour le cas H_2/O_2 #2.

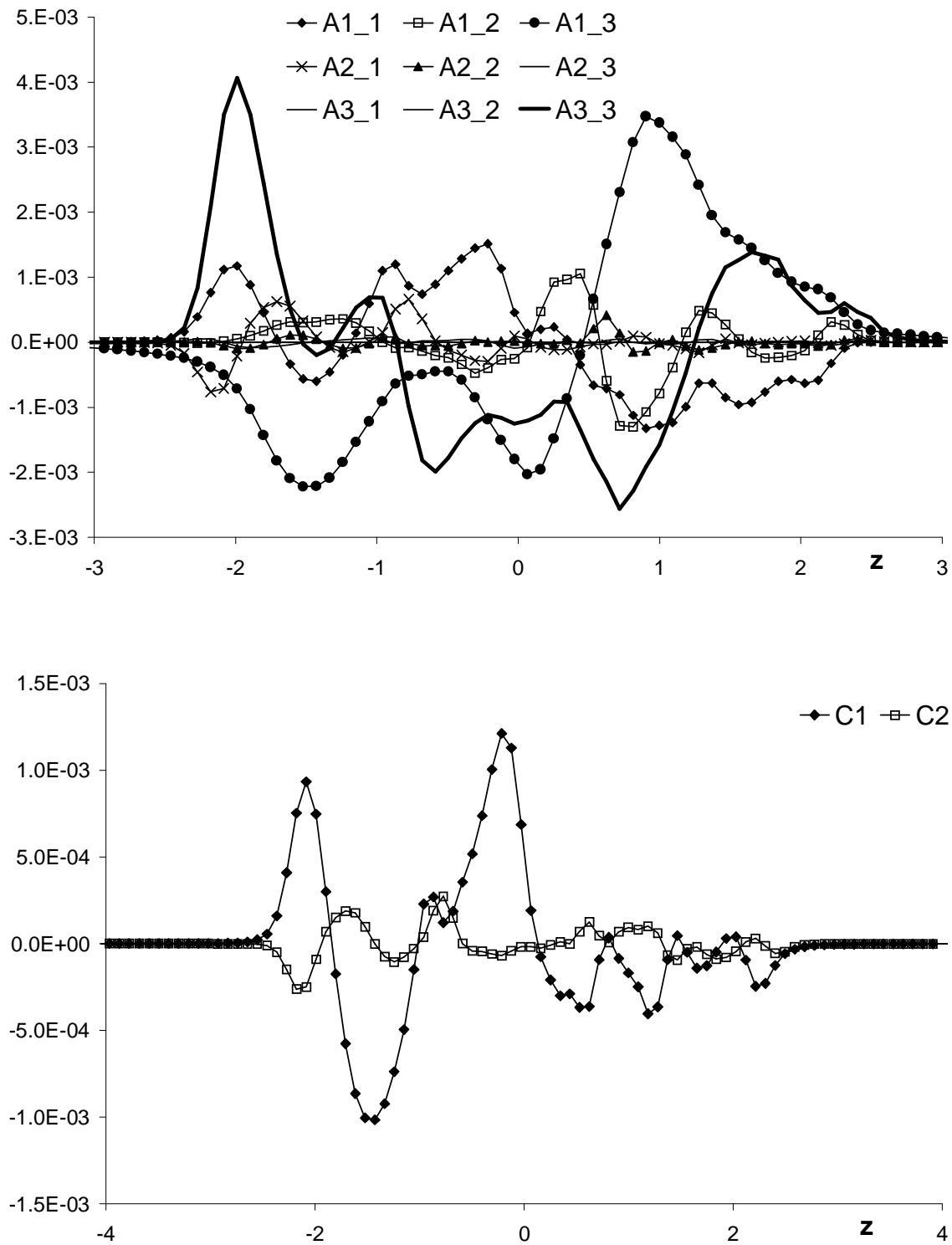


FIG. E.17 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas H_2/O_2 #3.

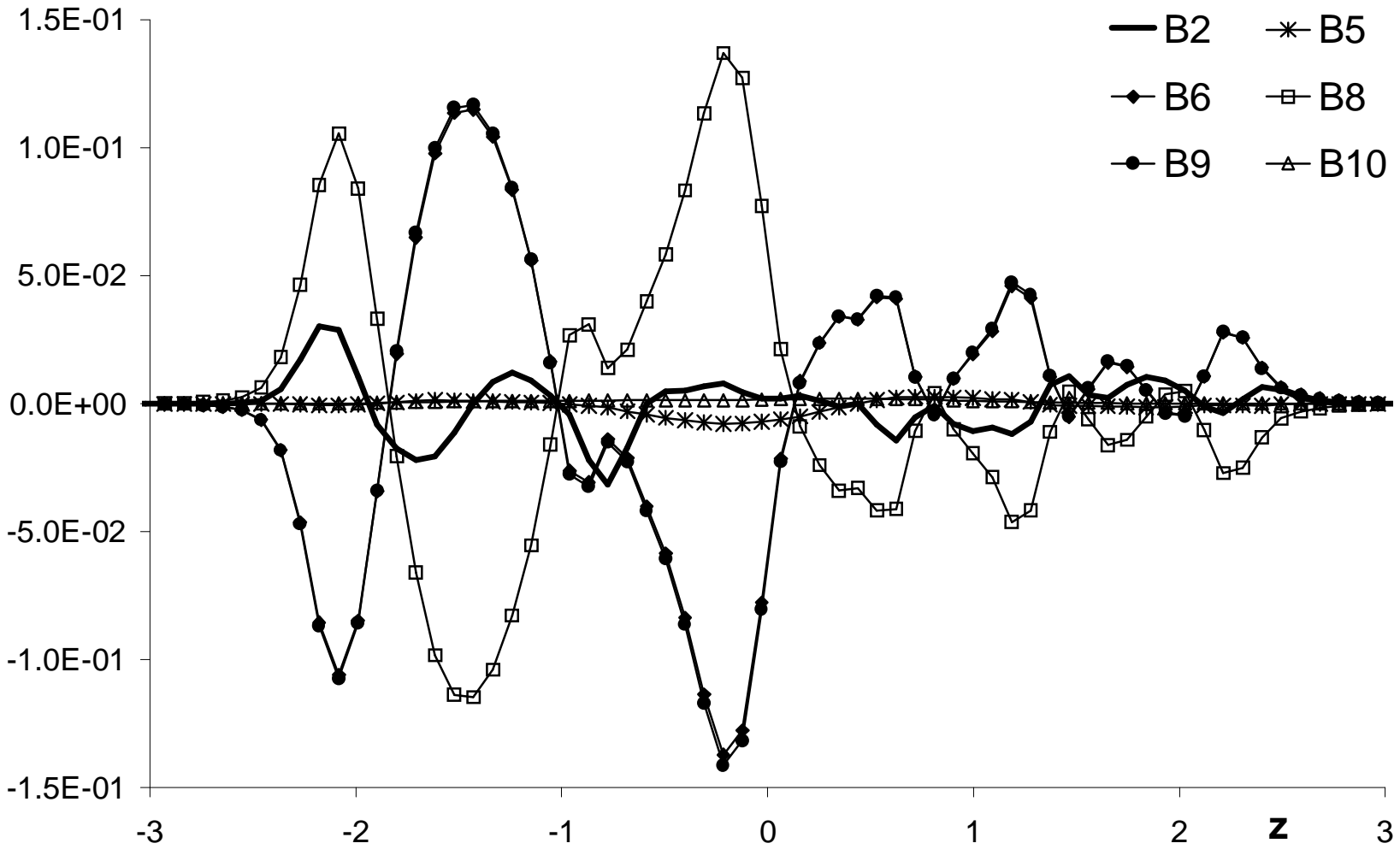


Fig. E.18 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas H_2/O_2 #3.

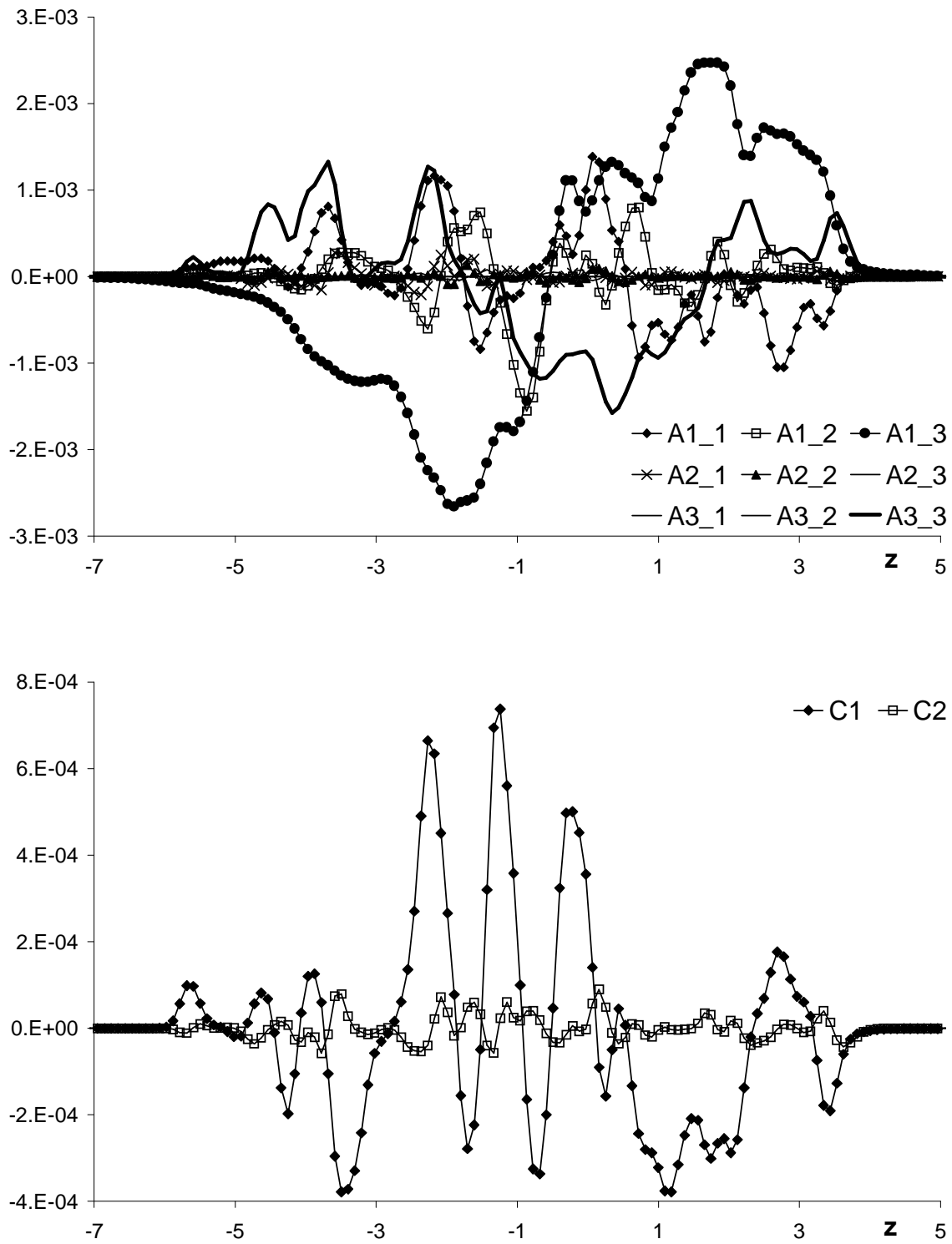


FIG. E.19 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas H_2/O_2 #4.

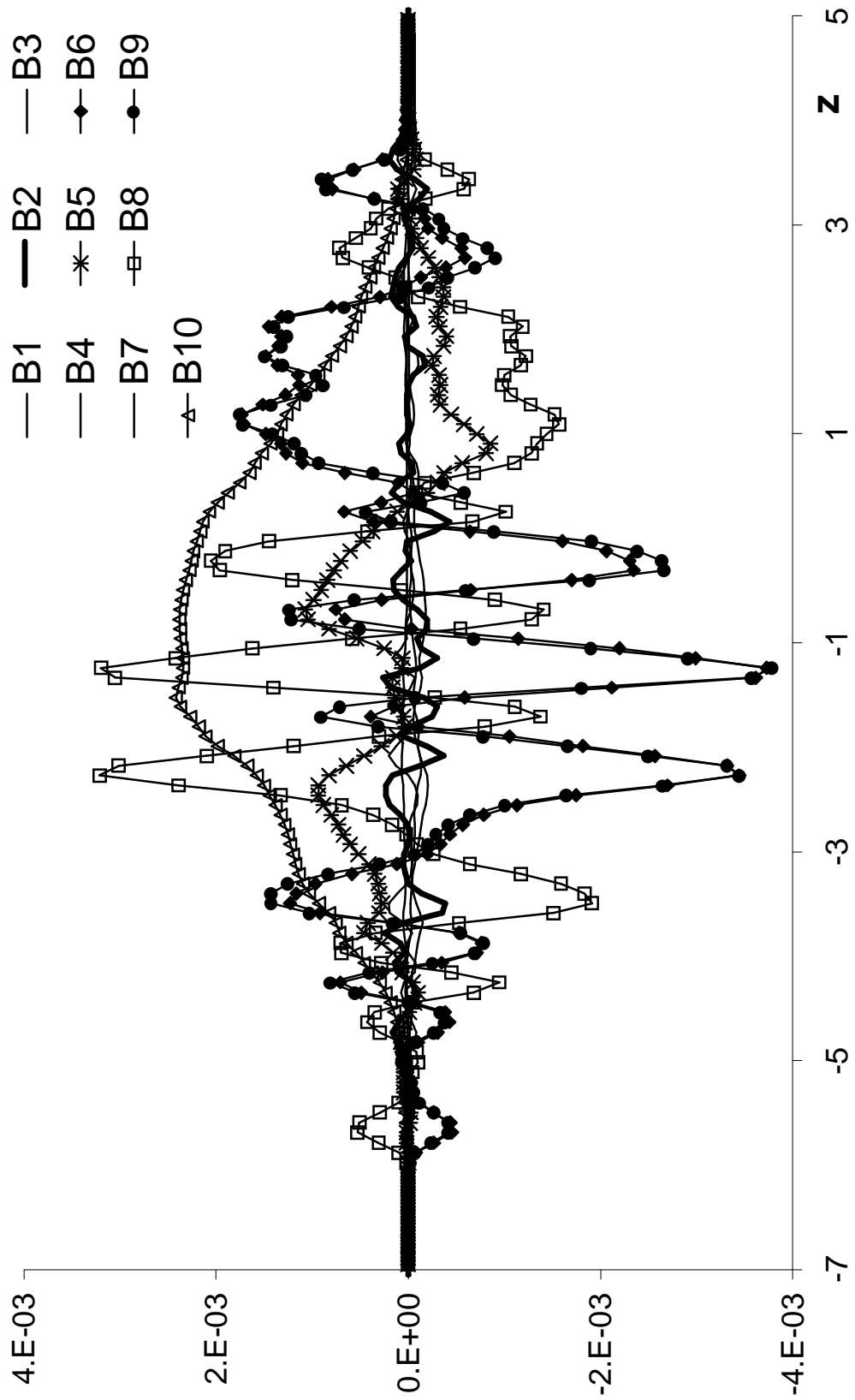


FIG. E.20 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas H_2/O_2 #4.

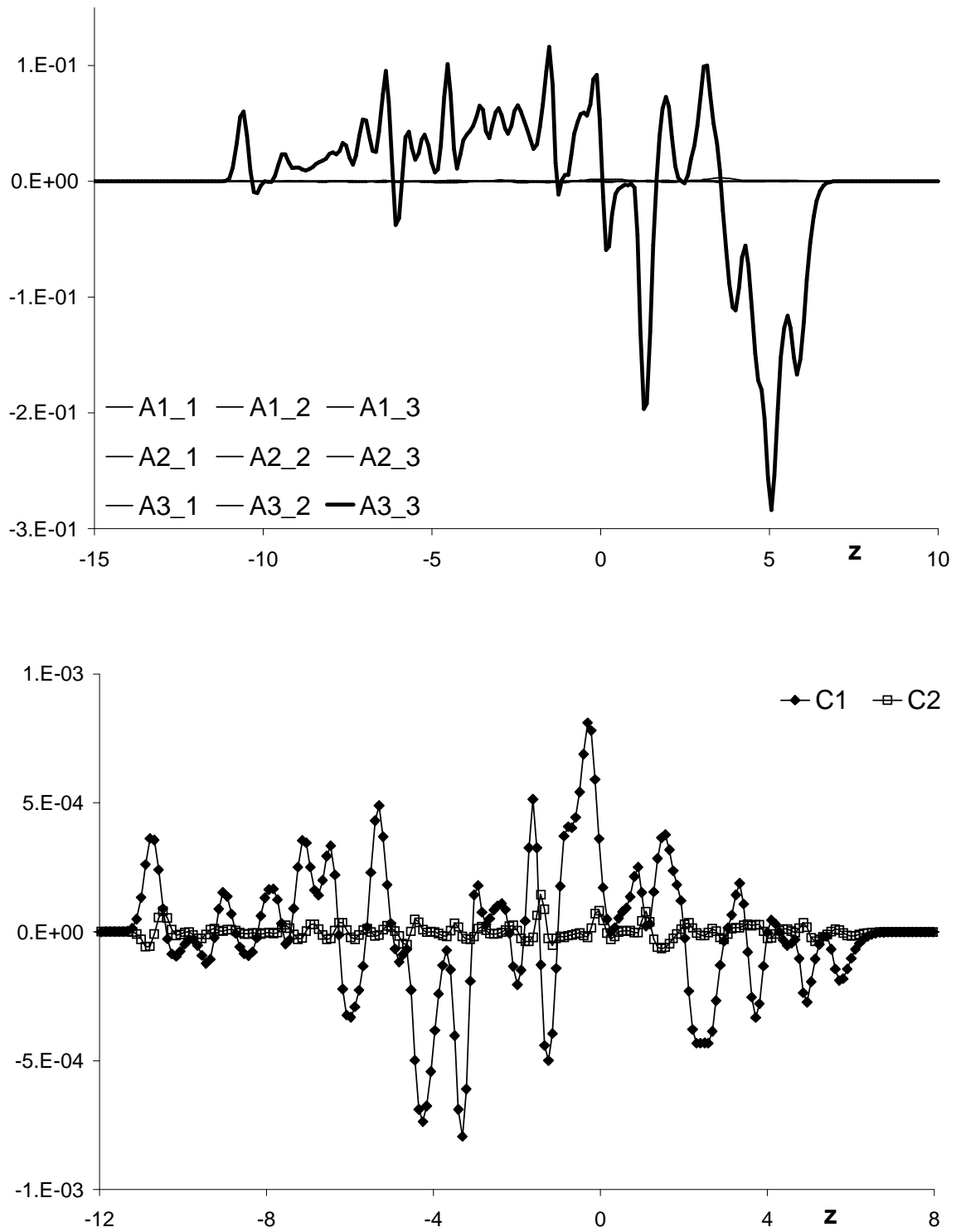


FIG. E.21 – Termes sous-maille de l'équation de quantité de mouvement (haut) et des espèces (bas) pour le cas H_2/O_2 #5.

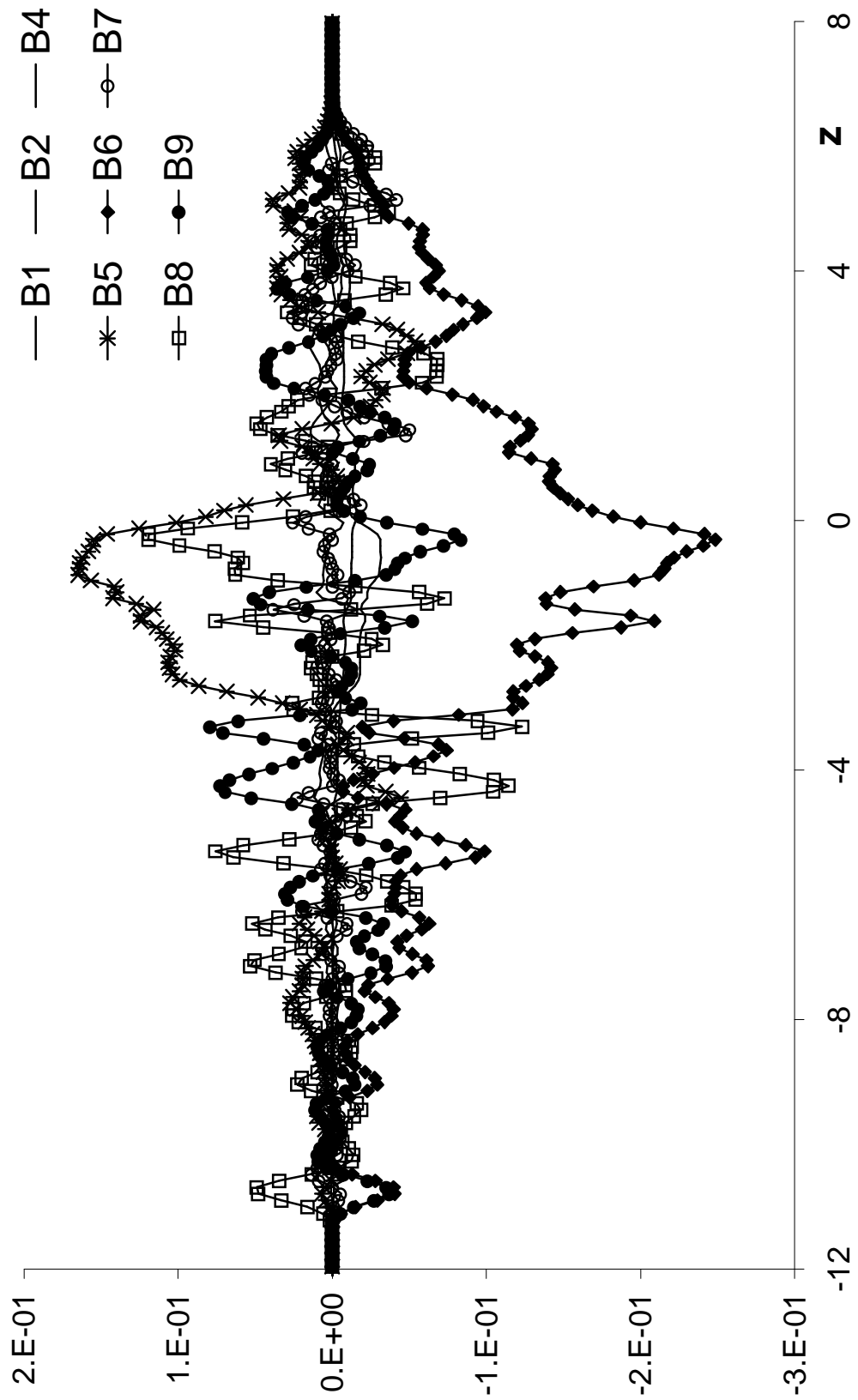


FIG. E.22 – Termes sous-maille de l'équation de l'énergie pour le cas H_2/O_2 #5.

Annexe F

Vers le MILES

Cette annexe présente quelques applications du code WENO afin d'illustrer ses capacités à appréhender une physique complexe. Les simulations sont bidimensionnelles et ne peuvent donc pas se prévaloir de la qualification MILES, néanmoins la qualité visuelle des résultats encourage l'application de la méthode en trois dimension.

Pour les calculs, deux types de configurations ont été étudiées :

- l'interaction de jets,
- l'interaction choc/jet.

Les conditions en entrée de domaine pour les jets sont prescrites sur la base de [108]. Les profils de vitesse et de fraction massique s'écrivent :

$$W(r) = W_{ext} + \frac{1}{2} \cdot (W_{int} - W_{ext}) \cdot \left\{ 1 - \tanh \left[\frac{1}{4} \cdot \frac{R}{\theta} \cdot \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) \right] \right\}$$

$$Y(r) = \frac{1}{2} \cdot \left\{ 1 - \tanh \left[\frac{1}{4} \cdot \frac{R}{\theta} \cdot \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) \right] \right\}$$

où,

- * W_{int} est la vitesse axiale d'injection,
- * W_{ext} est la vitesse du jet co-courant en entrée de domaine,
- * R est la demi-épaisseur dynamique, définie par $W(R) = (W_{int} - W_{ext})/2$,
- * θ est l'épaisseur de quantité de mouvement de la zone de cisaillement en $r = R$:

$$\theta = \int_0^\infty \frac{W(r)}{W_{int} - W_{ext}} \cdot \left(1 - \frac{W(r)}{W_{int} - W_{ext}} \right) \cdot dr$$

En pratique on a choisi pour toutes les simulations R comme épaisseur de référence et un rapport $R/\theta = 2$. La vitesse de référence est ici calculée comme $U_{ref} = (W_{int} + W_{ext})/2$. Le bruit en entrée de domaine est construit comme en section 10.3 avec une amplitude de 5%.

F.1 Interaction de jets

Dans cette première étude on s'intéresse à l'établissement d'un jet d'hydrogène dans un environnement d'oxygène initialement au repos en milieu confiné. Deux cas sont considérés : le jet seul et le jet en interaction à 45° (fig. F.1). Cet exemple subsonique met en évidence le fort caractère instationnaire de l'écoulement, notamment le battement des jets.

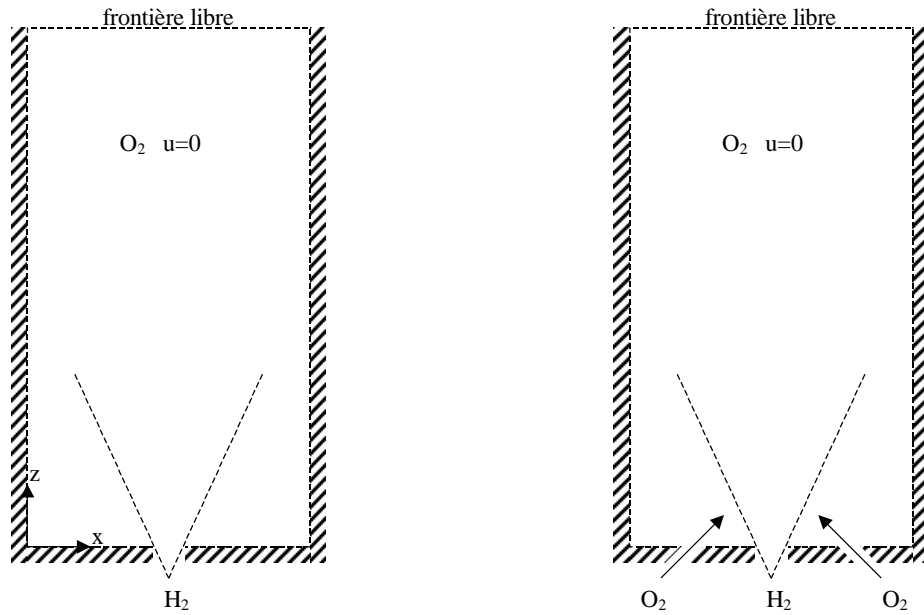


FIG. F.1 – Représentation schématique de l'interaction de jets. Jet simple à gauche et jets en interaction à droite.

Les paramètres des simulations sont détaillés en table F.1, où W_{inj} est la vitesse d'injection des jets à 45° et T_{inj} leur température. Ces deux jets supplémentaires sont localisés en $Lx/4$ et $3Lx/4$ et ont un diamètre identique au jet principal. Initialement le domaine est rempli d'oxygène au repos ($W_{ext} = 0$) à $T = 300K$. Les murs, ainsi que la frontière libre sont traités selon la procédure décrite en section 7.1.3.

Nom	Re_{ref}	$W_{int}(m/s)$	$W_{inj}(m/s)$	$T_{int}(K)$	$T_{inj}(K)$	M_c	$Lx \times Lz$	$Nx \times Nz$
Solo	10^3	500	—	200	—	0.35	40×100	512×512
Interaction	10^3	500	100	200	500	0.26	40×100	512×512

TAB. F.1 – Paramètres des tests de l'interaction de jets.

On a représenté en figure (F.2)–(F.9) les champs instantanés de densité, Mach et température pour ces deux cas. L'impulsion initiale du jet d'hydrogène induit un fort mouvement tourbillonnaire visible sur l'évolution temporelle des structures cohérentes. Le fait que le domaine soit fermé conduit à la naissance d'une zone de recirculation qui ajoute de l'en-trainement et influence fortement le comportement des jets à 45° .

Cet exemple démontre la capacité numérique du code WENO à capturer une physique instationnaire complexe, critère essentiel avant d'envisager le passage au cas réactif.

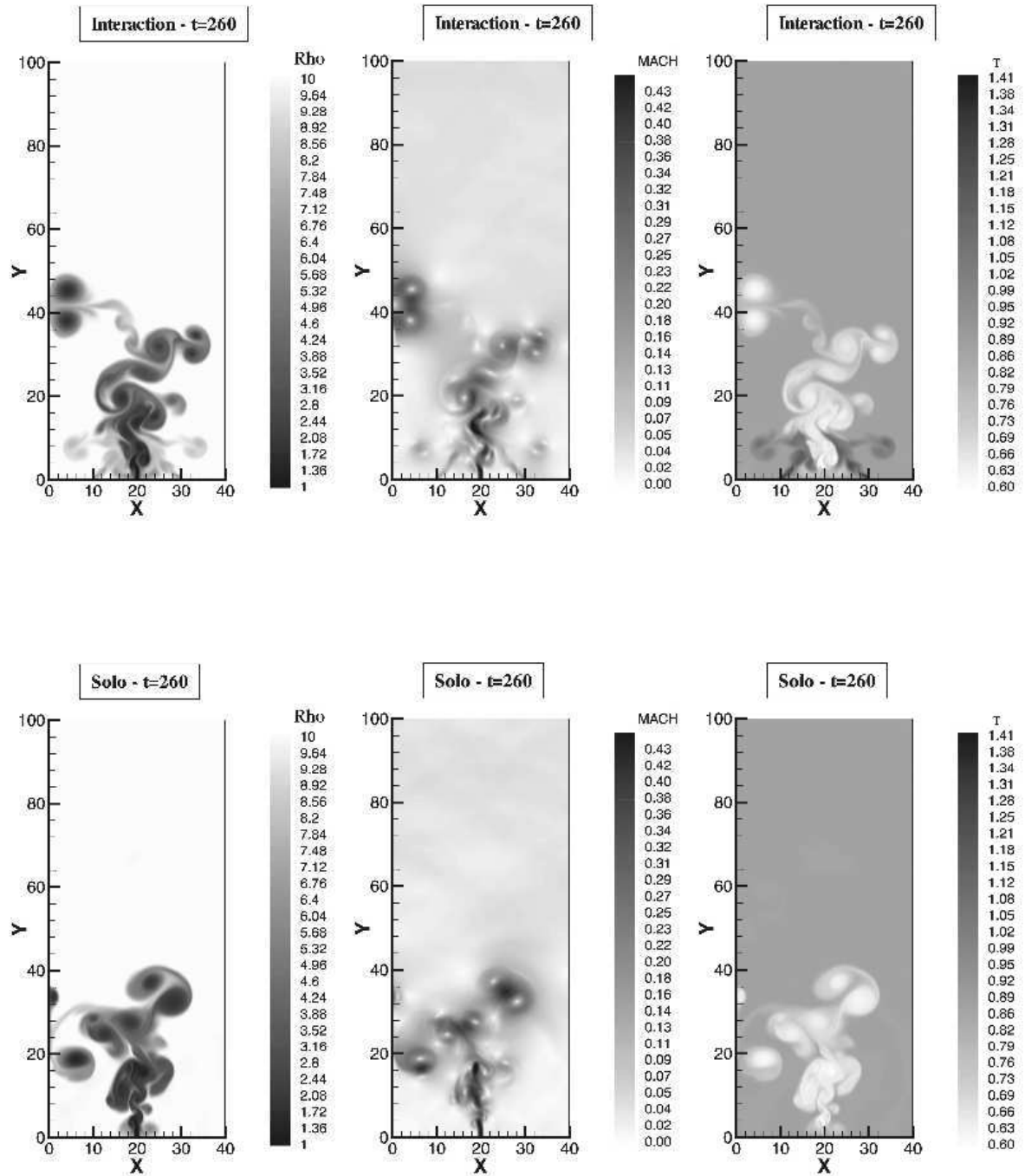


FIG. F.2 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 260$.

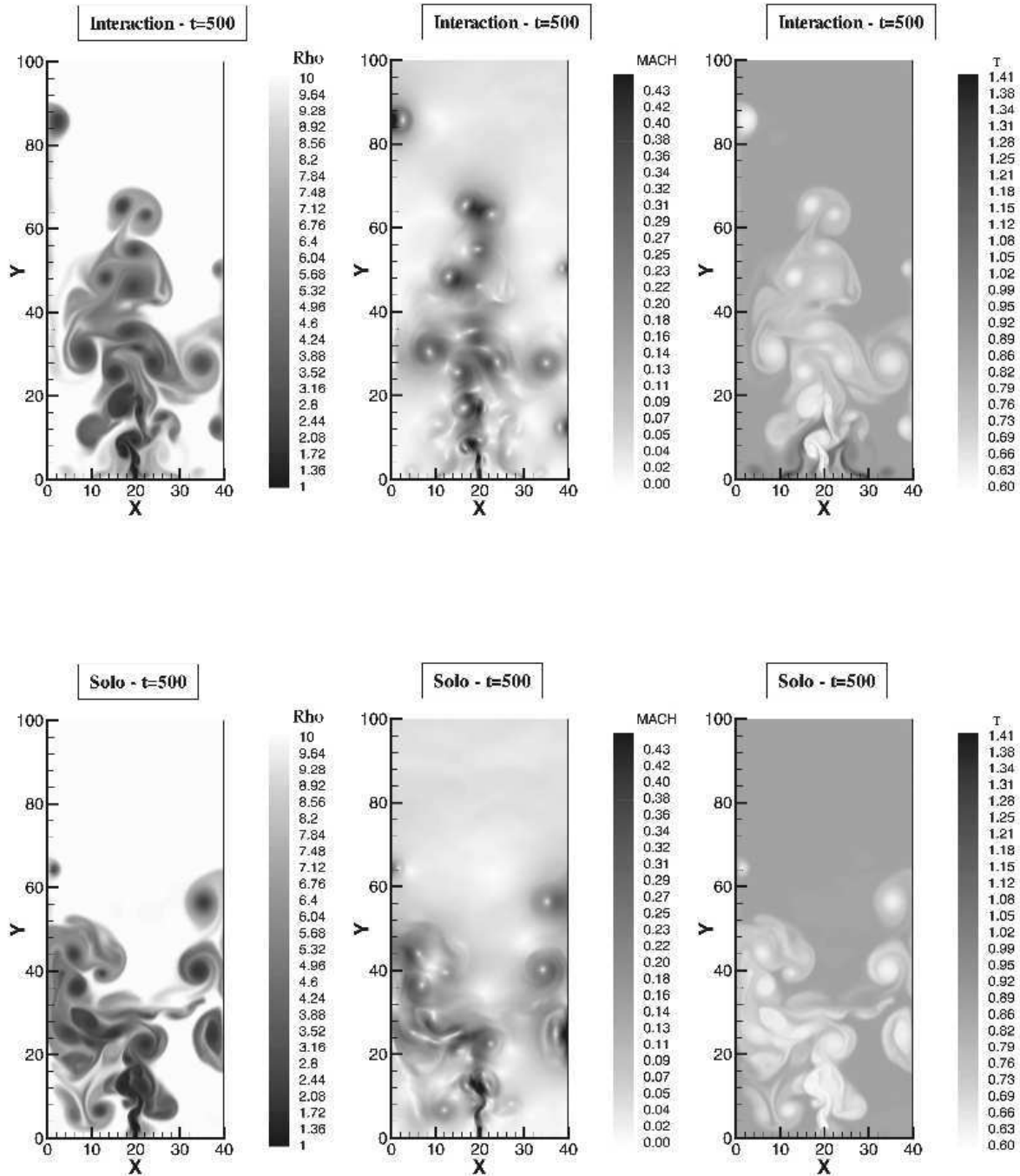


FIG. F.3 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 500$.

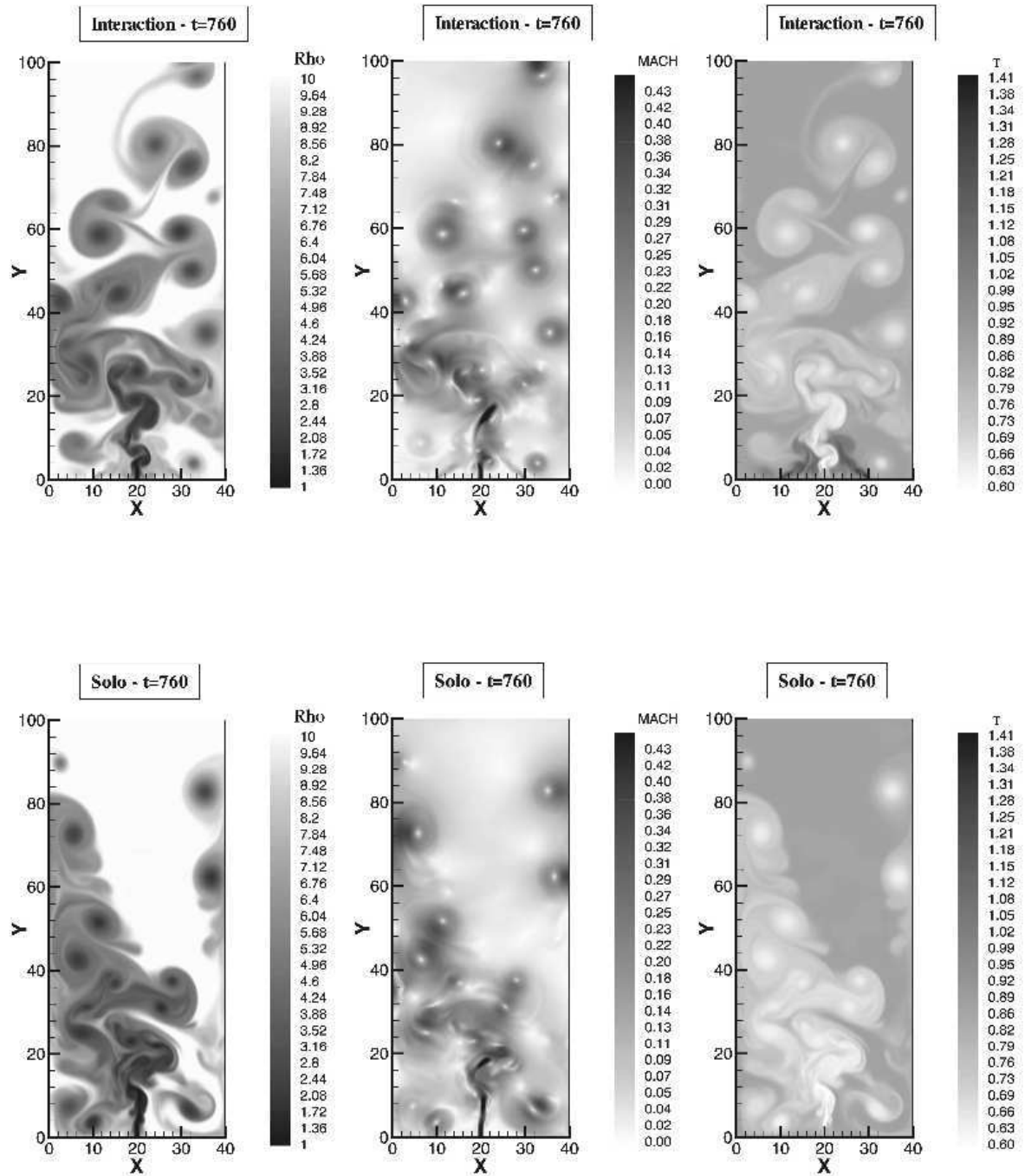


FIG. F.4 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 760$.

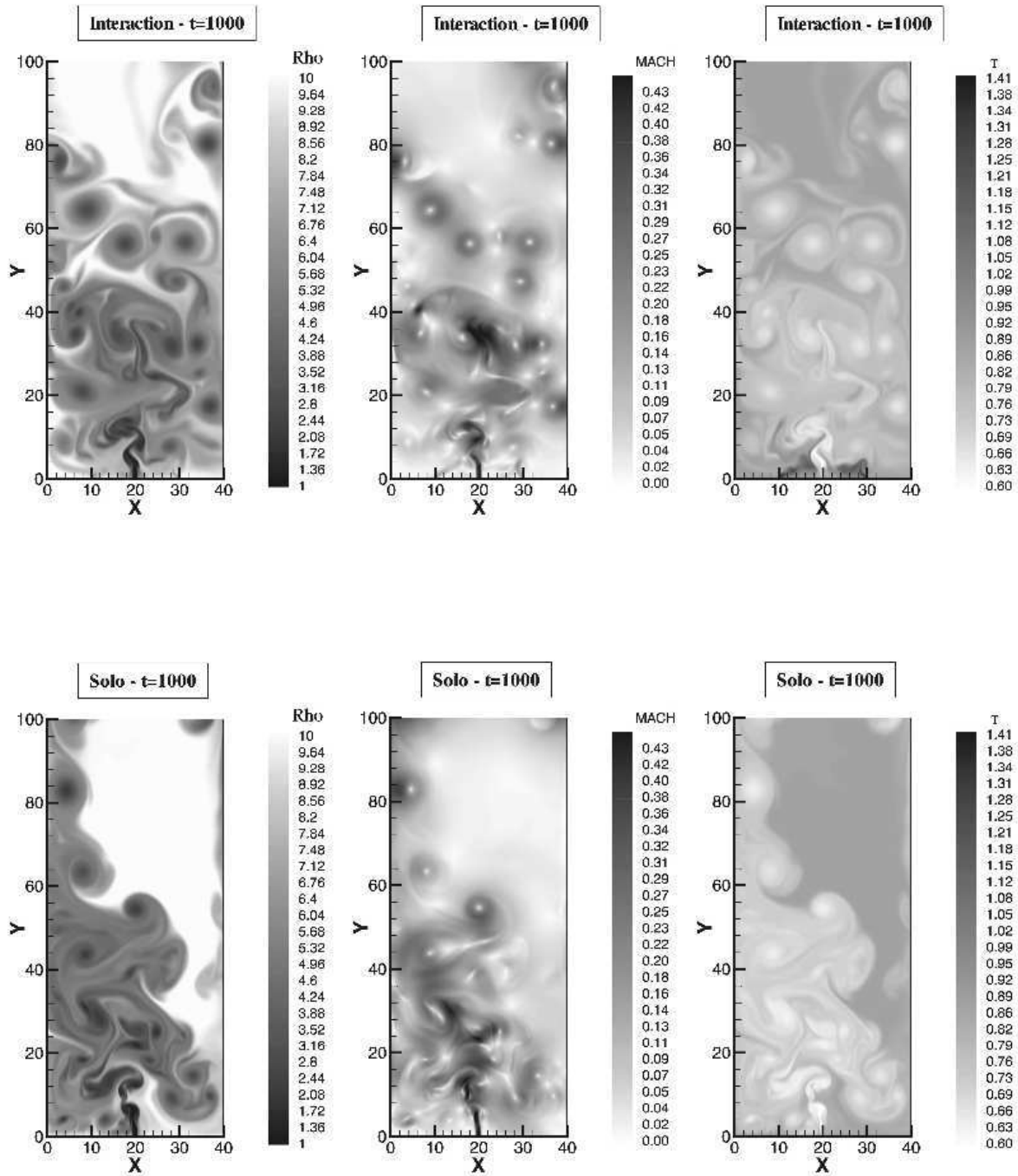


FIG. F.5 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 1000$.

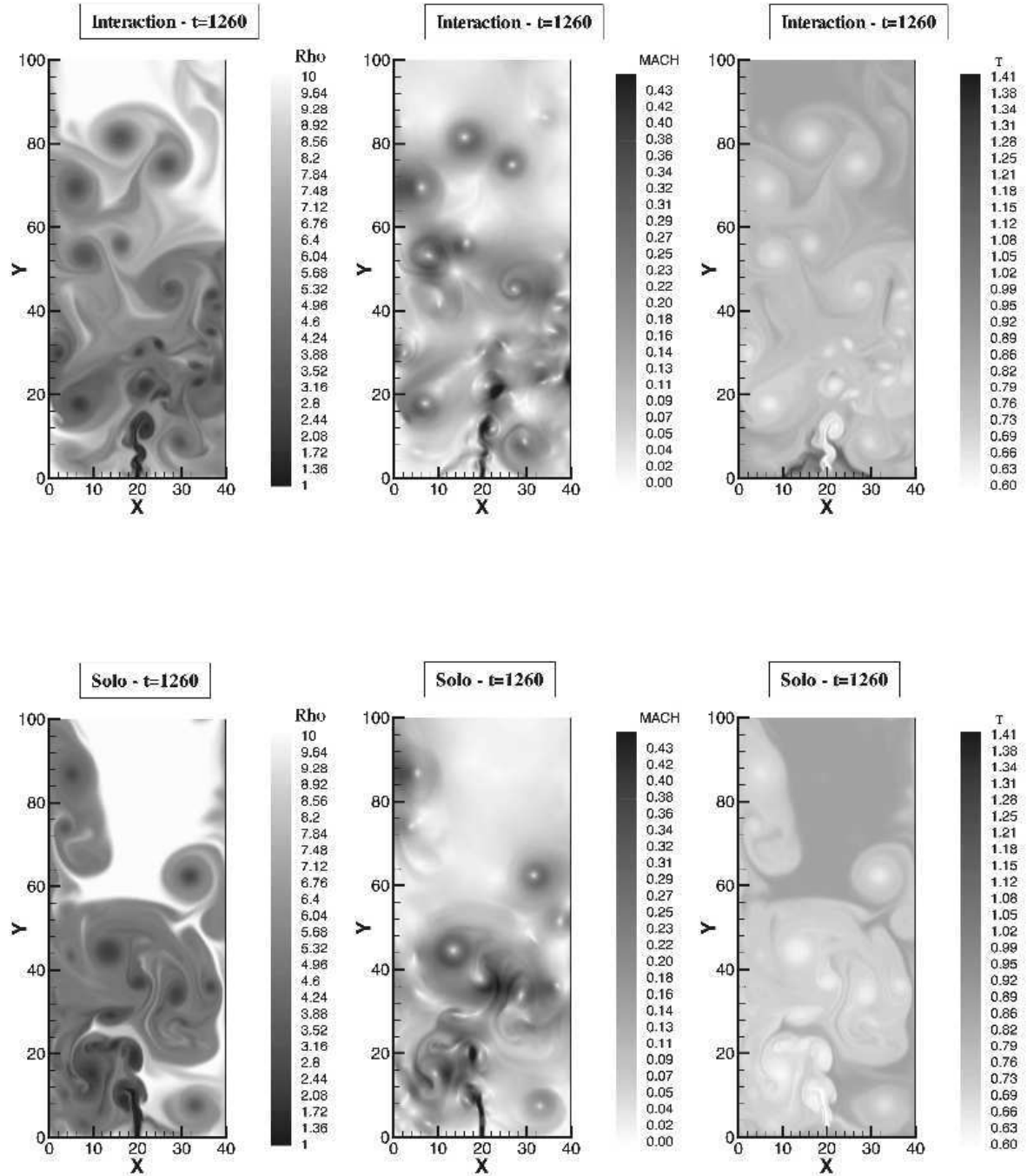


FIG. F.6 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 1260$.

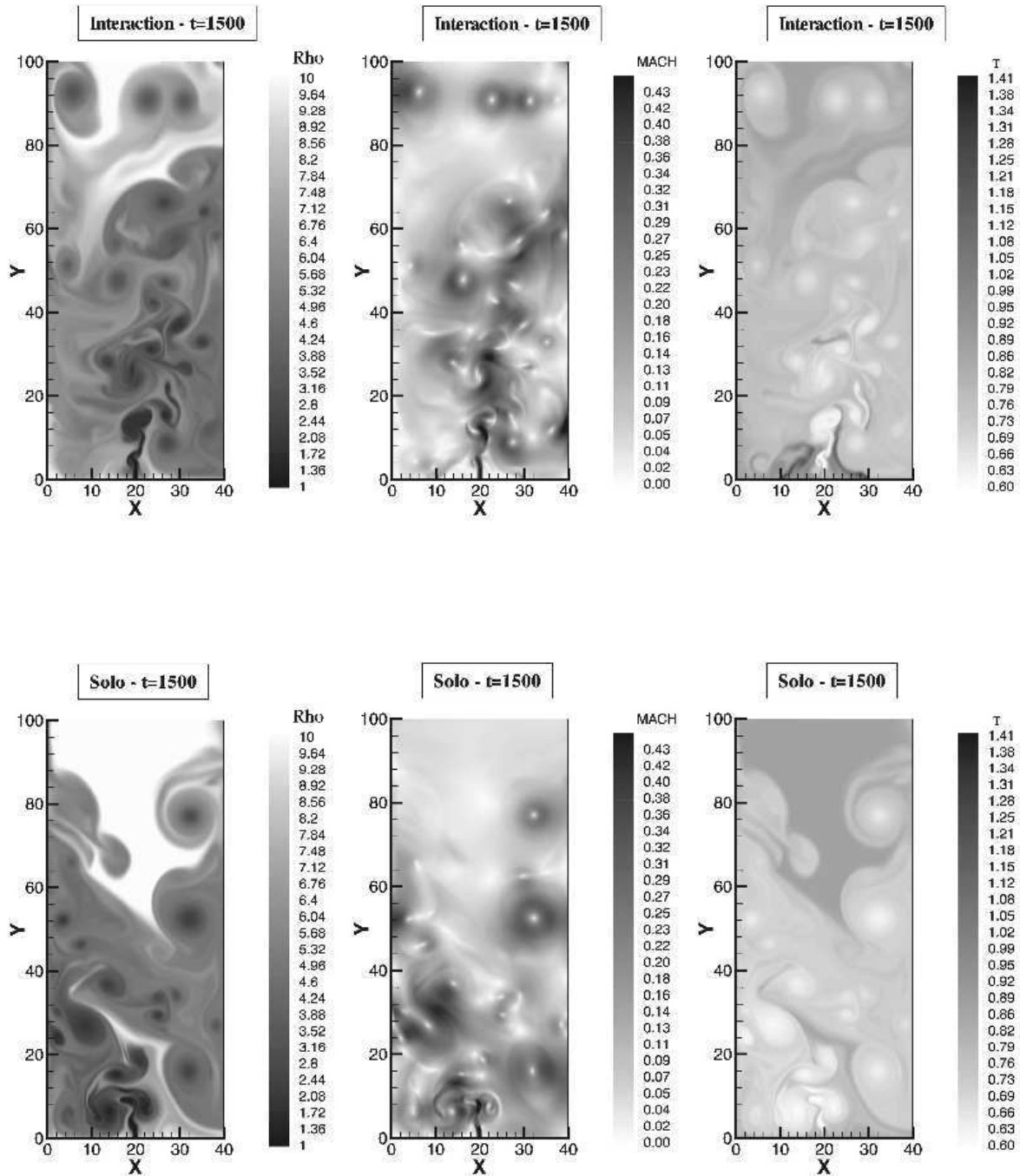


FIG. F.7 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 1500$.

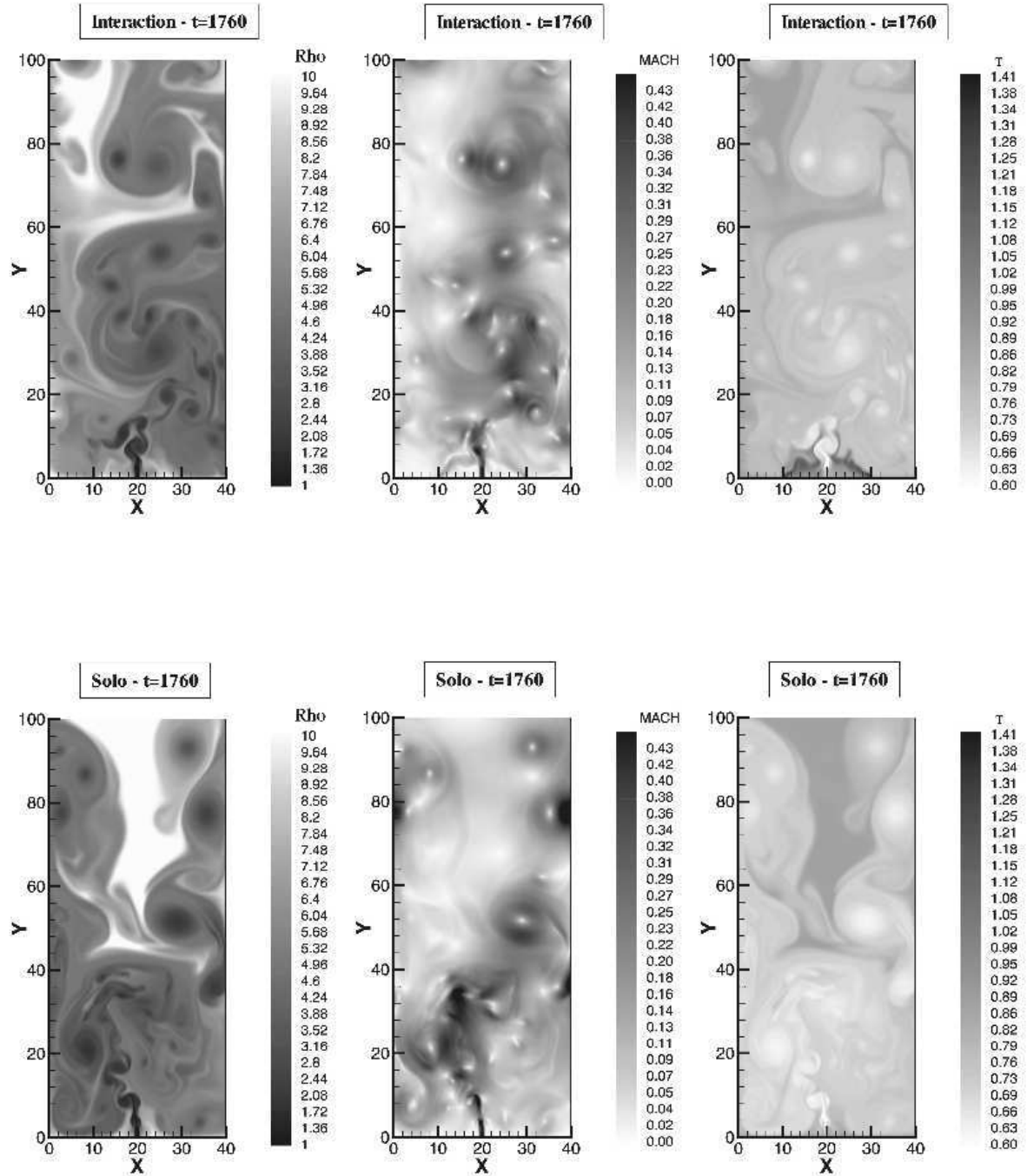


FIG. F.8 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 1760$.

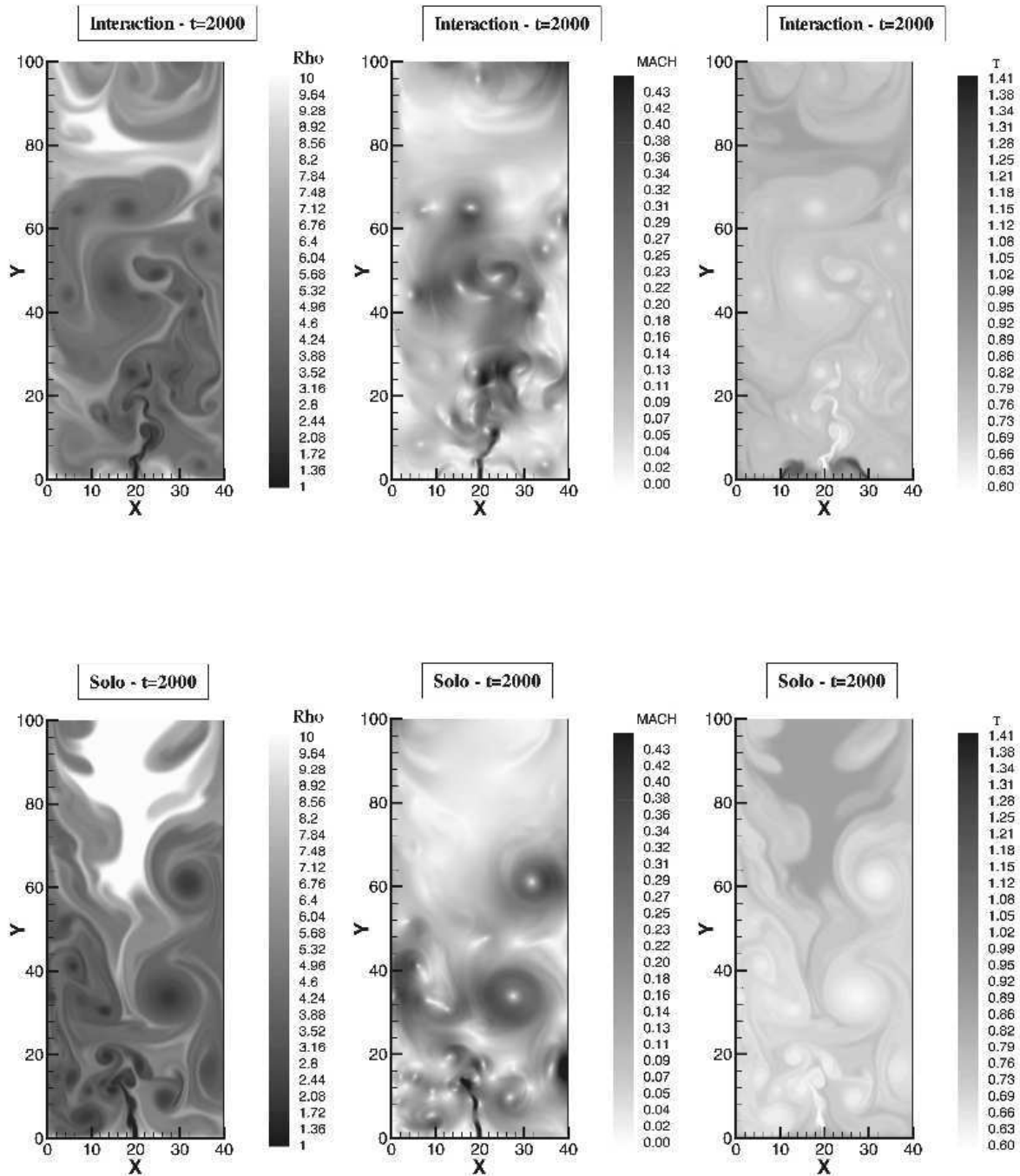


FIG. F.9 – Comparaison des champs instantanés de densité (gauche), Mach (milieu) et température (droite) pour l'interaction de jets à 45° et le jet seul à $t = 2000$.

F.2 Interaction choc/jet

L'interaction choc/jet est testée géométrie non triviale. Le choc est généré par une rampe de compression à 6.3° comme tracé en figure (F.10).

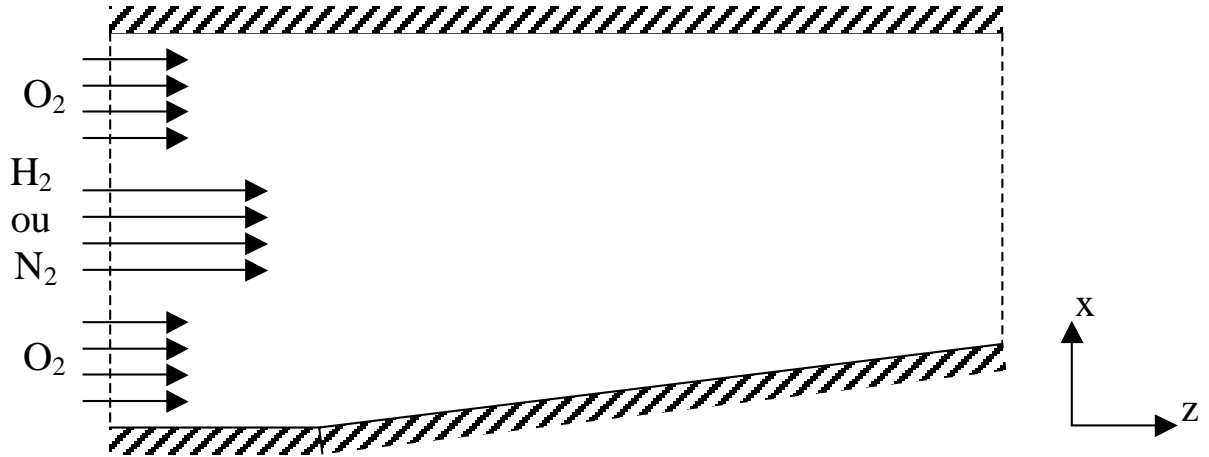


FIG. F.10 – Géométrie de l'interaction de choc/jet.

Le jet d'hydrogène ou d'azote est entouré d'un écoulement d'oxygène. Les paramètres des simulations sont détaillés en table F.2 auxquelles il faut ajouter les calculs sans choc $N_2/O_2\#2$ (paramètres identiques à $N_2/O_2\#1$) et $H_2/O_2\#5$ (paramètres identiques à $H_2/O_2\#1$).

Nom	Re_{ref}	$W_{int}(m/s)$	$W_{ext}(m/s)$	$T_{int}(K)$	$T_{ext}(K)$	M_c	$Lx \times Lz$	$Nx \times Nz$
$N_2/O_2\#1$	10^4	1000	500	300	300	0.73	40×200	512×512
$H_2/O_2\#1$	10^4	1000	500	300	300	0.30	40×200	512×512
$H_2/O_2\#4$	10^4	2000	500	300	300	0.91	40×200	512×512

TAB. F.2 – Paramètres des tests de l'interaction jet/choc.

On a représenté en figure (F.11) et (F.12) les champs instantanés de densité, Mach, pression et fraction massique du cas N_2/O_2 à $t = 1000$. Sur le champ de densité on note une homogénéisation plus rapide du mélange en présence du choc.

Pour le couple H_2/O_2 , les mêmes grandeurs que précédemment sont représentées en figure (F.13) et (F.14) pour les trois cas considérés. On note une forte interaction entre le choc principal et les structures cohérentes du jet : le choc est dévié en passant d'un fluide à l'autre mais subit également de fortes déformations lors du passage d'un tourbillon. Sur le champ de pression on constate un fort rayonnement acoustique du jet, amplifié au passage des chocs. L'augmentation de mélange constatée sur le cas #4 est plus liée à l'augmentation de quantité de mouvement de l'hydrogène qu'à l'influence du choc.

L'interaction jet/choc n'a pas été étudiée plus avant, mais là encore la qualité des résultats obtenus est encourageante. L'étude devrait être poursuivie sur des géométries réalistes par confrontation avec l'expérience.

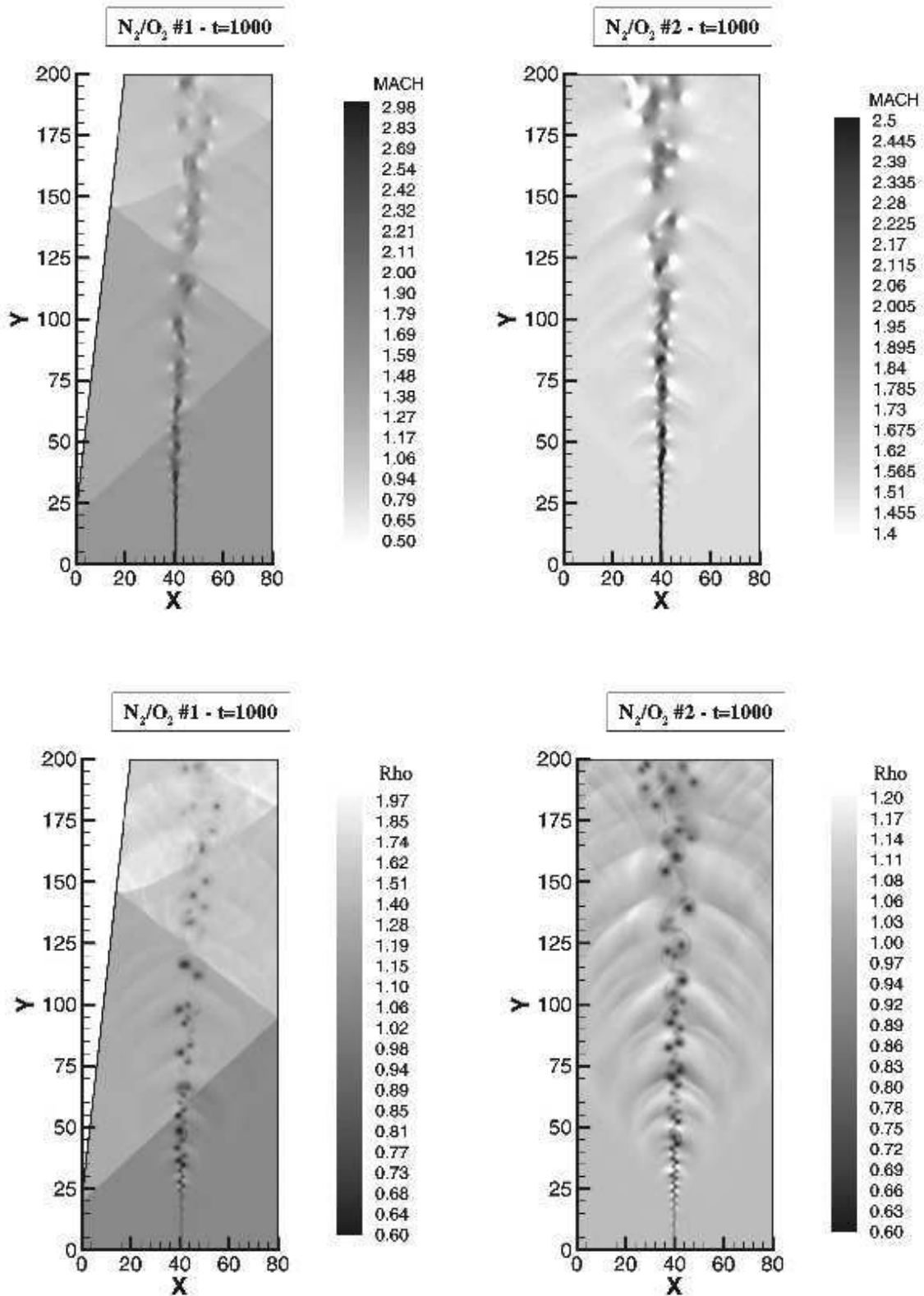


FIG. F.11 – Comparaison des champs instantanés de Mach et de densité, pour les mélanges N_2/O_2 #1 et #2 à $t = 1000$.

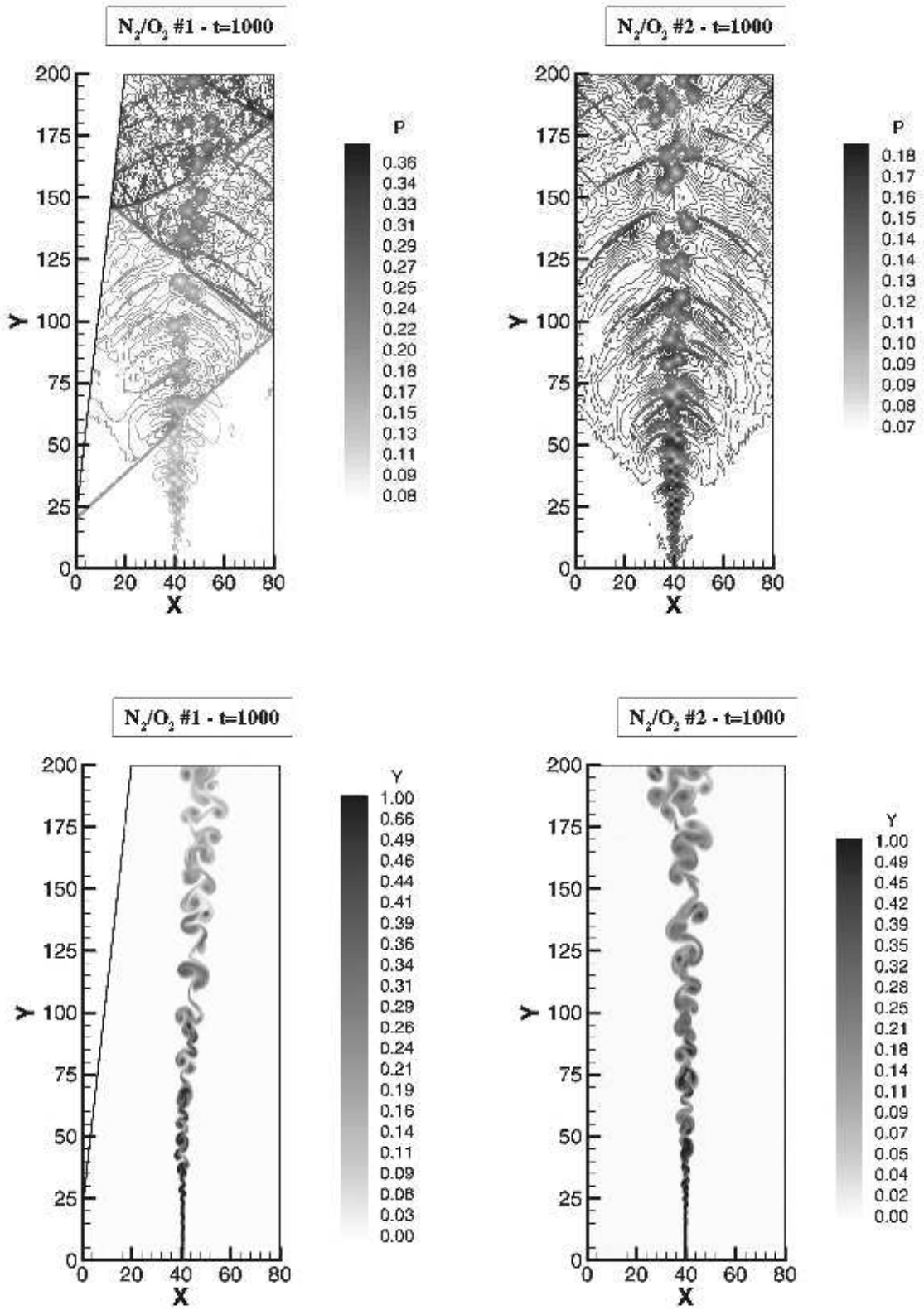


FIG. F.12 – Comparaison des champs instantanés de pression et de fraction massique, pour les mélanges N_2/O_2 #1 et #2 à $t = 1000$.

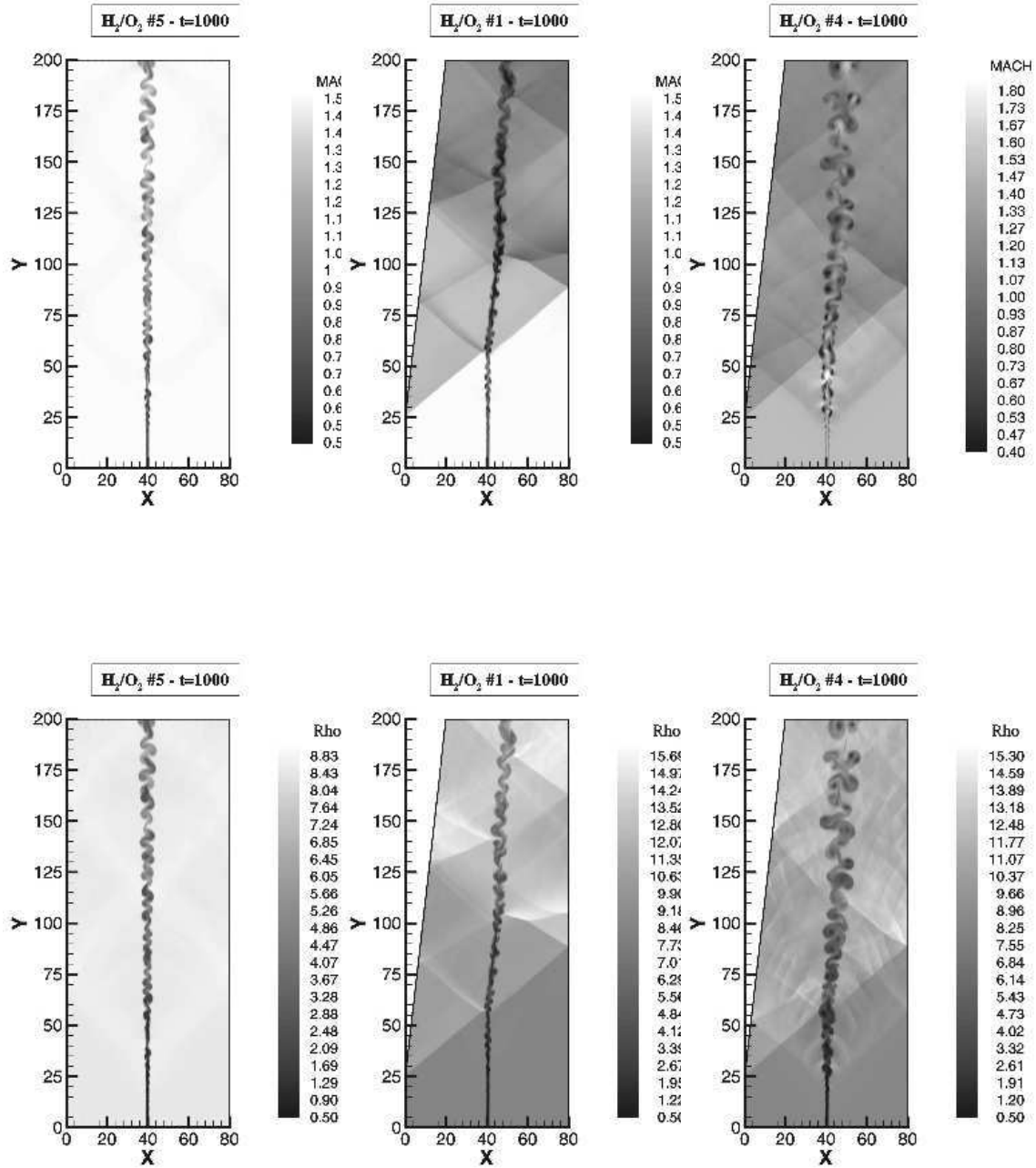


FIG. F.13 – Comparaison des champs instantanés de Mach et de densité, pour les mélanges H_2/O_2 #1, #4 et #5 à $t = 1000$.

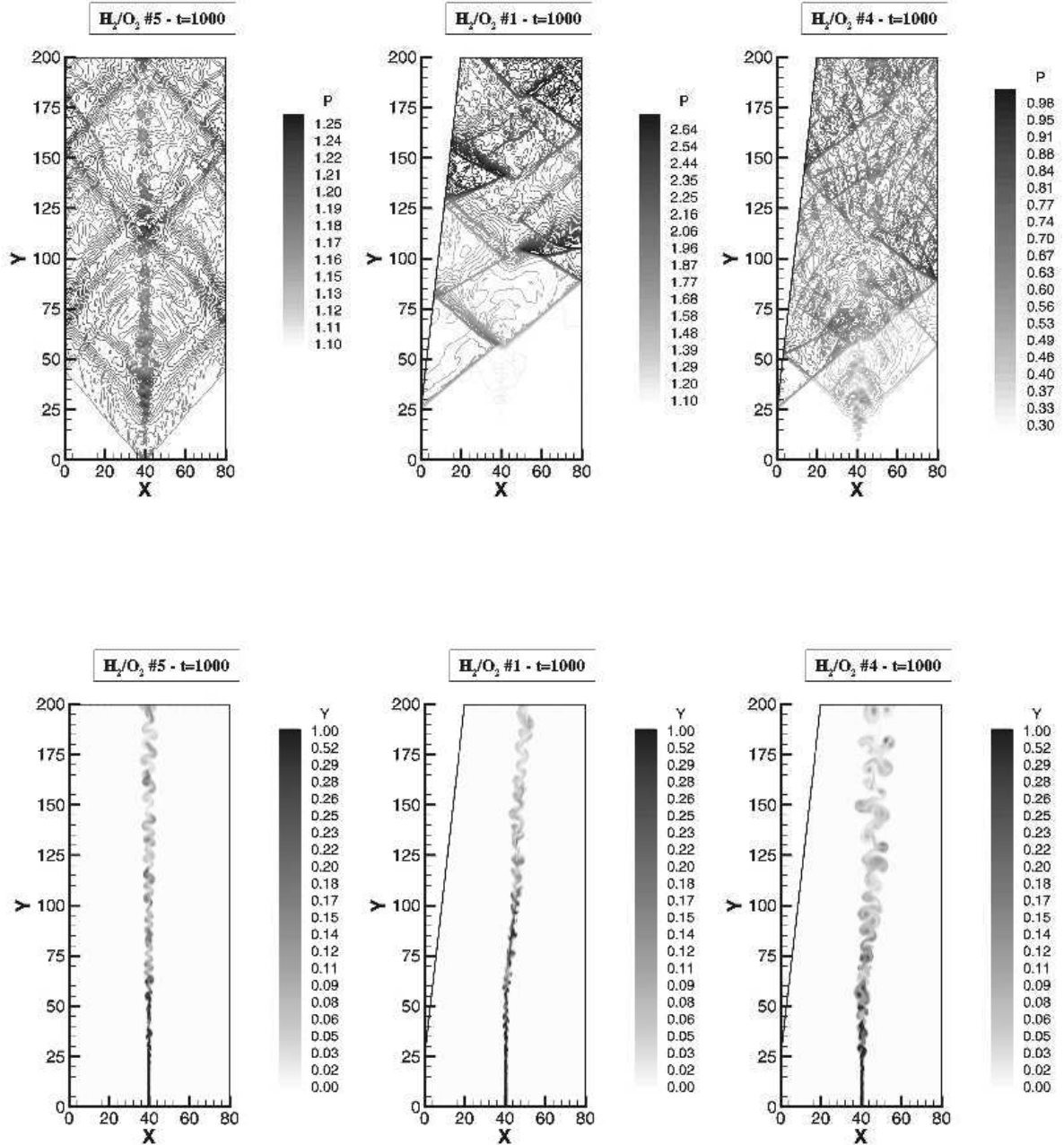


FIG. F.14 – Comparaison des champs instantanés de pression et de fraction massique pour les mélanges H_2/O_2 #1, #4 et #5 à $t = 1000$.

Table des figures

1	Représentation schématique d'une couche de mélange spatiale	1
2	Épaisseur normalisée de la couche de mélange compressible	2
3	Effet du rapport de densité sur l'évasement de la couche de mélange	3
1.1	Approches scientifiques classiques	7
1.2	Spectre d'énergie d'une THI	8
2.1	Noyaux des filtres boîte et porte	17
2.2	Changement de variables pour le filtrage inhomogène	18
2.3	Fonctions de transfert des filtres boîte discrets	20
2.4	Effet du filtre boîte discret sur une fonction test	20
2.5	Fonctions de transfert du filtre discret à moments gaussiens	23
2.6	Effet du filtre discret à moments gaussiens sur une fonction test	24
4.1	Filtrage <i>a priori</i>	30
4.2	Viscosité turbulente spectrale réduite	32
5.1	Erreur de troncature seule en formulation divergente	43
5.2	Erreur d'aliasing seule en formulation divergente	43
5.3	Erreur d'aliasing et de troncature en formulation divergente	44
5.4	Erreur de troncature en formulation convective	44
5.5	Burgers par formulation divergente	46
5.6	Burgers par formulation convective	47
5.7	Erreur d'aliasing pour la couche de mélange	48
5.8	Fonction de transfert des filtres compacts	50
5.9	Nombre d'onde modifié de l'opérateur Dérivation/Filtrage	51
5.10	Fonction de transfert de l'interpolateur compact	51
5.11	Principe d'interpolation	52
5.12	Erreur spectrale de l'interpolateur compact	53
5.13	Spectre de l'erreur d'aliasing après interpolation compacte	53
5.14	Fonction de transfert de l'opérateur Dérivation/Interpolation compact	54
5.15	Test de la méthode de filtrage	55
5.16	Comparaison statique du filtrage et de l'interpolation	56
5.17	Évolution initiale de la norme L^2 de l'erreur sur Burgers	56
5.18	Évolution finale de la norme L^2 de l'erreur sur Burgers	57
5.19	Comparaison dynamique du filtrage et de l'interpolation	57
5.20	Spectre d'énergie	60
5.21	Projecteur biaisé	61

5.22	Aliasing 3D seul	62
5.23	Troncature 3D seule	63
5.24	Erreur globale 3D	63
5.25	Transfert spectral	64
5.26	$\nu^t k''$ pour les schémas DF2 et SL4	64
5.27	Terme sous-maille	65
5.28	Erreur totale comparée au terme sous-maille	65
5.29	Spectre d'énergie à t=2	66
5.30	Évolution initiale de l'énergie cinétique	67
5.31	Évolution temporelle de l'énergie cinétique	67
5.32	Spectre d'énergie à t=40	68
6.1	Nombres d'onde modifiés des schémas du code COMPACT	73
6.2	Arbre programmatique du code COMPACT	74
6.3	Performances du code COMPACT	75
7.1	Part linéaire du nombre d'onde modifié du schéma WENO	79
7.2	Part non linéaire du nombre d'onde modifié du schéma WENO	80
7.3	Maillage plan pour le code WENO	83
7.4	Arbre programmatique du code WENO	85
7.5	Test 1 du couplage WENO/différences finies	86
7.6	Test 2 du couplage WENO/différences finies	87
7.7	Critère du test 2	87
7.8	Principe de décomposition de domaine	88
7.9	Efficacité parallèle du code WENO	89
8.1	Facteur d'amplification de RK4/Compact pour l'équation de convection linéaire	91
8.2	Equation de convection linéaire - 1	92
8.3	Equation de convection linéaire - 2	93
8.4	Équation de convection linéaire - 3	94
8.5	Equation de Burgers	95
8.6	Spectre de la solution de l'équation de Burgers par méthode WENO	95
8.7	Problème du tube à choc	96
8.8	Eddy shocklets dans la couche de mélange compressible à $Mc = 0.6$	97
8.9	Épaisseurs de quantité de mouvement sur la couche de mélange mono-espèce	98
8.10	Couche de mélange monoespèce sous forme conservative	99
8.11	Couche de mélange N_2/O_2 à 32^2 et 64^2	101
8.12	Couche de mélange N_2/O_2 à 128^2 et 256^2	102
8.13	Spectres de vitesse de la couche de mélange N_2/O_2 WENO et COMPACT	103
8.14	Spectres de vitesse de la couche de mélange N_2/O_2 WENO et COMPACT	104
8.15	Épaisseurs statistiques de la couche de mélange N_2/O_2 WENO et COMPACT	105
8.16	Couche de mélange H_2/O_2 à 64^2 et 128^2	107
8.17	Couche de mélange H_2/O_2 à 256^2 et 512^2	108
8.18	Spectres de vitesse de la couche de mélange H_2/O_2 WENO et COMPACT	109
8.19	Spectres de vitesse de la couche de mélange H_2/O_2 WENO et COMPACT	110
8.20	Épaisseurs statistiques de la couche de mélange H_2/O_2 WENO et COMPACT	111
9.1	Évolution des nombres de Prandtl et Schmidt pour divers mélanges	114

9.2	Effet de température sur les nombres de Prandtl et Schmidt par espèce . . .	115
9.3	Représentation schématique du tube à espèce	116
9.4	Coefficients de transport du mélange N_2/O_2 isotherme	118
9.5	Coefficients de transport du mélange H_2/O_2 isotherme	119
9.6	Coefficients de transport du mélange N_2/O_2 chauffée	120
9.7	Coefficients de transport du mélange H_2/O_2 chauffée	121
9.8	Épaisseurs statistiques des tests 2D	122
9.9	Spectres de vitesse longitudinale des tests 2D	123
9.10	Test 2D de la formulation des coefficients de transport pour le mélange H_2/O_2	124
10.1	Représentation schématique des paramètres de la couche de mélange en similitude	127
10.2	Représentation graphique de l'épaisseur de vorticit�� initiale	128
10.3	Profils initiaux en th pour la couche de mélange	129
10.4	Ondes de pression pour N_2/O_2 et H_2/O_2	130
10.5	Amplitude des ondes de pression pour N_2/O_2 et H_2/O_2	130
10.6	Domaine de calcul d'une couche de mélange temporelle	131
10.7	Algorithme de r��solution num��rique pour la couche de mélange temporelle .	136
10.8	Couche de mélange temporelle �� $Mc = 0.485$	138
10.9	Limite $v = 0$ pour la couche de mélange temporelle	139
10.10	Couche de mélange temporelle chauff��e	140
10.11	Crit��re de Rayleigh g��n��ralis��	141
10.12	Amplitude relative des ondes de pression	142
11.1	Taux de croissance temporelle selon Betchov & Szewczyk	144
11.2	Facteur d'amplification pour la couche de mélange plane	144
11.3	Modes doubles en ��coulement mono-esp��ce	145
11.4	Modes les plus instables de la couche <i>air - air</i>	145
11.5	Facteur d'amplification et vitesse de phase -1	150
11.6	Facteur d'amplification et vitesse de phase -2	151
11.7	Facteur d'amplification et vitesse de phase -2	151
11.8	Vitesse complexe des ondes du couple N_2/O_2	152
11.9	Zoom sur la vitesse complexe des ondes du couple N_2/O_2	152
11.10	Second zoom sur la vitesse complexe des ondes du couple N_2/O_2	152
11.11	Vitesse complexe des ondes du couple H_2/O_2	153
11.12	Zoom sur la vitesse complexe des ondes du couple H_2/O_2	153
11.13	Orientation des modes les plus instables	154
11.14	Facteur d'amplification de la couche de mélange H_2/O_2 isotherme	155
11.15	Taux de croissance temporelle de l'��nergie cin��tique fluctuante	156
11.16	Taux de croissance temporelle de l'��nergie cin��tique, cas chauff��	157
11.17	Couche de mélange H_2/O_2 et N_2/O_2	158
11.18	Couche de mélange H_2/O_2 seule	159
12.1	Représentation schématique de la couche de mélange temporelle 3D	161
12.2	Fraction massique �� $t = 100$ des cas N_2/O_2 #1, #2, #5 et #6	165
12.3	Nombre de Reynolds des ��chelles de Taylor des cas N_2/O_2 #1 �� #6	166
12.4	��paisseurs statistiques des cas N_2/O_2 #1 �� #6	167
12.5	Effet de compressibilit�� sur le cas N_2/O_2 #5	168

12.6	Évolution temporelle des termes sous-maillages de l'équation de l'énergie pour N_2/O_2	170
12.7	Termes sous-maillages de l'équation de l'énergie pour N_2/O_2	171
12.8	Termes sous-maillages des équations de quantité de mouvement pour N_2/O_2	172
12.9	Termes sous-maillages de l'équation des espèces pour N_2/O_2	173
12.10	Loi d'état filtrée pour N_2/O_2	173
12.11	Fraction massique à $t = 100$ des cas H_2/O_2 #1, #2, #4 et #5	176
12.12	Nombre de Reynolds des échelles de Taylor des cas H_2/O_2 #1, #2, #4 et #5	177
12.13	Épaisseurs statistiques des cas H_2/O_2 #1, #2, #4 et #5	178
12.14	Évolution temporelle des termes sous-maillages de l'équation de l'énergie pour H_2/O_2	179
12.15	Termes sous-maillages de l'équation de l'énergie pour H_2/O_2	180
12.16	Termes sous-maillages des équations de quantité de mouvement pour H_2/O_2	181
12.17	Termes sous-maillages de l'équation des espèces pour H_2/O_2	182
12.18	Loi d'état filtrée pour H_2/O_2	182
B.1	Grille de reconstruction	191
C.1	Cluster EPEE	198
D.1	Représentation schématique des paramètres de la couche de mélange en similitude	199
D.2	Couche de mélange spatiale en similitude, $u_2 = 100m/s$ et $u_1 = 300m/s$	204
D.3	Couche de mélange spatiale en similitude, $u_2 = 100m/s$ et $u_1 = 1000m/s$	205
D.4	Paramètre de Chapman-Rubensin	205
E.1	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #1	208
E.2	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #1 (suite)	209
E.3	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #2	210
E.4	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #2 (suite)	211
E.5	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #3	212
E.6	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #3 (suite)	213
E.7	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #4	214
E.8	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #4 (suite)	215
E.9	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #5	216
E.10	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #5 (suite)	217
E.11	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #6	218
E.12	Termes sous-maille pour le cas N_2/O_2 #6 (suite)	219
E.13	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #1	220
E.14	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #1 (suite)	221
E.15	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #2	222
E.16	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #2 (suite)	223
E.17	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #3	224
E.18	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #3 (suite)	225
E.19	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #4	226
E.20	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #4 (suite)	227
E.21	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #5	228
E.22	Termes sous-maille pour le cas H_2/O_2 #5 (suite)	229

F.1	Représentation schématique de l'interaction de jets	232
F.2	Interaction de jets, $t = 260$	233
F.3	Interaction de jets, $t = 500$	234
F.4	Interaction de jets, $t = 760$	235
F.5	Interaction de jets, $t = 1000$	236
F.6	Interaction de jets, $t = 1260$	237
F.7	Interaction de jets, $t = 1500$	238
F.8	Interaction de jets, $t = 1760$	239
F.9	Interaction de jets, $t = 2000$	240
F.10	Géométrie de l'interaction de choc/jet	241
F.11	Interaction choc/jet cas $N_2/O_2\#1$	242
F.12	Interaction choc/jet cas $N_2/O_2\#2$	243
F.13	Interaction choc/jet cas $H_2/O_2\#1$, #4 et #5	244
F.14	Interaction choc/jet des cas $H_2/O_2\#1$, #4 et #5 (suite)	245

Bibliographie

- [1] Amram, K. *Etude numérique des instabilités dans les couches de mélange compressibles*. Thèse du LadHyX, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France, 1995.
- [2] Anderson, J.D. *Computational fluid dynamics : the basics with applications*. McGraw-Hill-Series in Mechanical Engineering, 1995.
- [3] Andreopoulos, Y., Agui, J.H., Briassulis, G. *Shock wave-turbulence interactions*. Annu. Rev. Fluid Mech, textbf32, pp 309-345, 2000.
- [4] Bardina, J., Ferziger, J.H., et Reynolds, W.C. *Improved subgrid scale models for large eddy simulation*. AIAA paper 80-1357, 1980.
- [5] Baum, M., Poinso, T.J., Thevenin, D. *Accurate boundary conditions for multi-component reactive flows*. Journal of Computational Physics, **116**, pp 247-261, 1994.
- [6] Betchov, R., Szewczyk, A. *Stability of a shear layer between parallel streams*. Phys. Fluids **6** 10, pp 1391-1396, 1963.
- [7] Betchov, R., Criminale, W.O. *Stability of parallel flows*. Academic Press, Applied Mathematics and Mechanics, vol. 10, 1967.
- [8] Blumen, W., Drazin, P.G. et Billings, D.F. *Shear layer instability of an inviscid compressible fluid. Part 2*. Journal of Fluid Mechanics, **71**, part 2, pp 305-316, 1975.
- [9] Boersma, B. J., Lele, S.K. *Large eddy simulation of compressible turbulent jets*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs 1999.
- [10] Bogdanoff D.W. *Compressibility effects in turbulent shear layers*. AIAA Journal, Vol. 21, No 6, pp 926-927, 1983.
- [11] Boris, J.P., Grinstein, F.F., Oran, E.S., et Kolbe, R.L. *New insights into large eddy simulation*. Fluid Dynamics Research, **10**, pp 199-228, 1992.
- [12] Bradshaw, P. *The effect of initial conditions on the developpement of a free shear layer*. Journal of Fluid Mechanics, **26**, part 2, pp 225-236, 1966.
- [13] Brown, G.L., Roshko, A. *On density effects and large structure in turbulent mixing layers*. Journal of Fluid Mechanics, **64**, part 4, pp 775-816, 1974.
- [14] Bushe, W. K., Bilger, R.W. *Direct numerical simulation of turbulent non-premixed combustion with realistic chemistry*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs 1998.
- [15] Calhoon, W., Menon, S. *Subgrid modelling for reacting large eddy simulation*. Proc. of the 34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA, Reno, Vol. 96-0516, 1996.

- [16] Canuto, C., Hussaini, M.Y., Quarteroni, A., et Zang, T.A. *Spectral methods in fluid dynamics*. Springer-Verlag, 1988.
- [17] Chergui, J., Dupays, I., Girou, D., Requena, S. *Cours MPI-1 Cours de formation de l'IDRIS*, 1999.
- [18] Chollet, J.P., et Lesieur, M. *Parametrisation of small scales of the three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures*. J. Atmos. Sci., **38**, pp 2747-2757, 1981.
- [19] Comte, P., Lesieur, M., et Lamballais, E. *Large and small-scale stirring of vorticity and a passive scalar in a 3D temporal mixing layer*. Phys. Fluids A, **4**, pp 2761-2778, 1992.
- [20] Comte, P., et Lesieur, M. *Large-eddy simulations of compressible turbulent flows*. Von Karman Lecture Series 1998-05, 1998.
- [21] Delannoy, C. *Programmer en Fortran 90*. Eyrolles, 1993.
- [22] Dimotakis, P.E., Brown, G.L. *The mixing layer at high Reynolds numbers : large structure dynamics and entrainment*. Journal of Fluid Mechanics, **78**, part 3, pp 535-560, 1976.
- [23] Dimotakis, P.E. *Turbulent free shear layer mixing and combustion*. High Speed Flight Propulsion Systems, Chapter 7, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 137, 1991.
- [24] Ducros, F. *Simulations numériques directes et des grandes échelles de couches limites compressibles*. Thèse INPG, 1995.
- [25] Ducros, F., Ferrand, V., Nicoud, C., Weber, C., Darracq, D., Gacherieu, C., Poinsot, T. *Large-eddy simulation of the shock/turbulence interaction*. Journal of Computational Physics, textbf152, pp 514-549, 1999.
- [26] Elane, S., Oran, E.S., et Boris, J.P. *Computing turbulent shear flows - A convenient conspiracy*. Computers in physics , vol.7, No. 5, pp 523-533, 1993.
- [27] Erlebacher, G., Hussaini, M.Y., Speziale, C.G. et Zang, T.A. *Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows*. Journal of Fluid Mechanics, **238**, pp 155-185, 1992.
- [28] Ern, A., Giovangigli, V. *Multicomponent transport algorithms*. Springer Verlag, 1994.
- [29] Favre, A. *Equations des gaz turbulents compressibles. ii - méthode des vitesses macroscopiques pondérées par la masse volumique*. Journal de Mécanique, **4**, pp 391-421, 1965.
- [30] Fediou, I., Lardjane, N., Gökalp, I. *Revisiting numerical errors in direct and large-eddy simulations of turbulence : physical and spectral spaces analysis*. Journal of Computational Physics, **174**, pp 1-36, 2001.
- [31] Ferziger, J.H. *The physics and simulation of turbulence state of the art 1998*. Von Karman Lecture Series 1998-05, 1998.
- [32] Fureby, C., et Grinstein, F.F. *Monotonically integrated large-eddy simulation of free shear flows*. AIAA Journal, Vol.37, No.5, pp 544-556, 1999.
- [33] Garnier, E. *Simulation des grandes échelles en régime transonique*. Thèse de l'Université Paris XI Orsay, 2000.

-
- [34] Ghosal, S. *An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence*. J. Comp. Phys. **125**, pp 187-206, 1996.
- [35] Godlewski, E., Raviart, P.-A. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*. Applied Mathematical Series, vol. 118, SPRINGER, 1996.
- [36] Gondet, E., Lavallée, P.-F. *Cours OpenMP*. Cours de formation de l'IDRIS, 2000.
- [37] Grasseau, G., Voury *Vectorisation*. Cours de formation de l'IDRIS, 1997.
- [38] Gropp, W., Lusk, E., Skjellum, A. *Using MPI : portable parallel programming with the message passing interface*. MIT Press, 1994.
- [39] Guerts, B., Vreman, B., Kuerten, H., et Van Buuren, R. *Noncommuting filters and dynamic modelling for LES of turbulent compressible flow in 3D shear layers*. The Second ERCOFTAC Workshop on Direct and Large Eddy Simulation, Sept. 16-19, Grenoble, France, 1996.
- [40] Gutmark, E.J., Schadow, K.C., Yu, K.H. *Mixing enhancement in supersonic free shear flows*. Ann. Rev. Fluid Mech., Vol. 27, pp 375-417, 1995.
- [41] Harran, G. *Analyse physique, modélisation et simulation numérique des mécanismes de mélange dans les jets simples et coaxiaux turbulents*. Thèse INPT, 1994.
- [42] Harten, A., Engquist, B., Osher, S., et Chakravarthy, S. *Uniformly high order essentially nonoscillatory schemes, III*. J. Comp. Phys. **71**, pp 231-303, 1987.
- [43] Hirschfelder, Curtis, Bird *Molecular theory of gases and liquids*. 1967.
- [44] Huerre, P. *The non linear stability of a free shear layer in the viscous critical layer regime*. Phil. Trans. R. Soc. London **A 293**, pp 643-675, 1980.
- [45] Hureau, J. *La transformation conforme et l'étude numérique d'écoulements stationnaires ou instationnaires autour d'obstacles avec sillage*. Thèse de l'Université d'Orléans, 1988.
- [46] Julien, J.-R. *Accélération de la convergence vers une solution stationnaire des calculs en aérothermique*. Thèse de l'Université Blaise Pascal, 1997.
- [47] Kozusko, F., Grosch, C.E., Jackson, T.L., Kennedy, C.A., Gatski, T.B. *The structure of variable property, compressible mixing layers in binary gas mixtures*. Phys. Fluids **8(7)**, pp 1945-1953, 1996.
- [48] Kozusko, F., Lasseigne, D.H., Grosch, C.E., Jackson, T.L. *The stability of compressible mixing layers in binary gases*. Phys. Fluids **8(7)**, pp 1954-1963, 1996.
- [49] Kraichnan, R.H. *Eddy viscosity in two and three dimensions*. J. Atmos. Sci. **33**, pp 1521-1536, 1976.
- [50] Kravchenko, A.G., Moin, P. *On the effect of numerical errors in large-eddy simulations of turbulent flows*. J. Comp. Phys. **131**, pp 310-322, 1997.
- [51] Kropchenov, V.I., Lombov, K.E. *The enhancement of the mixing and combustion processes applied to scramjet engines*. AIAA Paper **92-3428**, 1992.
- [52] Krothapalli, A., Bogdanoff, D., Karamcheti, K. *On the mixing of a rectangular jet*. J. Fluid. Mech. **107**, pp 201-220, 1981.
- [53] Lees, L., Lin, C.C. *Investigation of the stability of the laminar boundary layer in a compressible fluid*. N.A.C.A. Tech. Note 1115, 1946.

- [54] Lees, L. *The stability of the laminar boundary layer in a compressible fluid*. N.A.C.A. Tech. Rept. No. 876, 1947.
- [55] Lele, S.K. *Direct numerical simulation of compressible free shear flows*. AIAA paper **89-0374**, 1989.
- [56] Lele, S.K. *Compact finite difference schemes with spectral like resolution*. J. Comp. Phys. **103**, pp 16-42, 1992.
- [57] Lele, S.K. *Compressibility effects on turbulence*. Ann. Rev. Fluid Mech. **26**, pp 211-255, 1994.
- [58] Lesieur, M. *Turbulence in fluids*. Martinus Nijhoff Publishers, 1987.
- [59] Lesieur, M., Staquet, C., Le Roy, P., Comte, P. *The mixing layer and its coherence examined from the point of view of two-dimensional turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, **192**, pp 511-534, 1988.
- [60] Lesieur, M., Metais, O. *New trends in large eddy simulations*. Annu. Rev. Fluid Mech. **28**, pp 45-82, 1996
- [61] Liu, X.D., Osher, S., Chan, T. *Weighted essentially nonoscillatory schemes*. J. Comp. Phys. **115**, pp 200-212, 1994.
- [62] Lorillu, O. *Etude d'écoulements cisailés multi-espèces*. DEA Energétique de l'Université d'Orléans, 1999.
- [63] Lund, T. *On the use of discrete filters for large eddy simulation*. Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs, 1997.
- [64] Luneau, J., Bonnet, A. *Théorie de la dynamique des fluides*. CEPADUES-EDITIONS, 1989.
- [65] Meneveau, C. *Statistics of turbulence subgrid-scale stresses : necessary conditions and experimental tests*. Physics of Fluids, **6**, 815-833, 1994.
- [66] Meneveau, C., et Katz, J. *Scale-invariance and turbulence models for large-eddy simulation*. Annu. Rev. Fluid Mech. **32**, pp 1-32, 2000.
- [67] Stone, C., Menon, S. *Dynamics and analysis of vortex-flame interaction in swirling combustion flows*. Proc. of the 2nd International Symposium of Turbulence and Shear Flow Phenomena, Stockholm, Vol. 2, pp. 485-490, 2001.
- [68] Mesnier, B. *Etudes sur le développement de jets turbulents à masse volumique variable, à géométries axisymétriques et asymétriques*. Thèse de l'Université d'Orléans/LCSR, 2001.
- [69] Metais, O., Lesieur, M. *Spectral large eddy simulation of isotropic and stably stratified turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, **239**, pp 157-194, 1992.
- [70] Michalke, A. *On the inviscid stability of the hyperbolic tangent velocity profile*. Journal of Fluid Mechanics, **19**, part 3, pp 543-556, 1964.
- [71] Moin, P., Squires, K., Cabot, W., et Lee, S. *A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport*. Physics of Fluids A, **3**, pp 2746-1757, 1991.
- [72] Moin, P., Mahesh, K. *DIRECT NUMERICAL SIMULATION : A tool in turbulence research*. Annu. Rev. Fluid Mech. **30**, pp 539-578, 1998
- [73] Monin, A.S., Yaglom, A.M. *Statistical Mechanics*. The MIT Press, 1971.

-
- [74] Montigny-Rannou, F. *Influence de l'effet d'aliasing sur la résolution numérique des équations de Navier-Stokes par méthodes spectrales*. La Recherche Aéronautique **2**, pp 93-99, 1982.
- [75] Morinishi, Y., Lund, T., Vasilyev, O., Moin, P. *Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow*. J. Comp. Phys. **143**, pp 90-124, 1998.
- [76] Najjar, F.M., Tafti, D.K. *Study of discrete test filters and finite difference approximations for the dynamic subgrid-scale stress model*. Phys. of Fluids **8**(4), pp 1076-1088, 1996.
- [77] Normand, X., Comte, P., Lesieur, M. *Simulation numérique d'une couche de mélange se développant spatialement*. La Recherche Aéronautique **6**, pp 45-52, 1988.
- [78] Orszag, S.A. *Analytical theories of turbulence*. Journal of Fluid Mechanics, **41**, pp 363-386, 1970.
- [79] Papamoschou, D., Roshko, A. *The compressible turbulent shear layer : an experimental study*. Journal of Fluid Mechanics, **197**, pp 453-477, 1988.
- [80] Piomelli, U. *Large-eddy simulation of turbulent flows*. Von Karman Lecture Series 1998-05, 1998.
- [81] Poinso T. J., Lele S. K. *Boundary conditions for direct numerical simulations of compressible viscous flows*. J. Comp. Phys. **101**, pp 104-129, 1992.
- [82] Poinso, T., Veynante, D. *Theoretical and numerical combustion*. Edwards, 2001.
- [83] Press, W. H., Teukolsky, S.A., & Al., *Numerical recipes in fortran*. 2nd edition, Cambridge University Press, 1992
- [84] Rayleigh, Lord *On the stability or instability of certain fluid motions*. In Scientific Papers, Vol. 3, pp. 17-23. Cambridge Univ. Press, 1887.
- [85] Reid, R.C., Prausnitz, J.M., Poling B.E. *The properties of gases and liquids*. Mc Graw Hill, 1988.
- [86] Reynolds, O. *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels*. In Scientific Papers, Vol. 2, pp. 51-105. Cambridge Univ. Press, 1883.
- [87] Reynolds, W.C. *Whither turbulence? Turbulence at the crossroads*. Lecture Notes in Physics 357, ed. J.L. Lumley, Springer, Berlin, pp 313-342, 1990.
- [88] Richardson, L.F. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1922.
- [89] Le petit Robert, *Dictionnaire de la langue française*. 1992.
- [90] Sagaut, P. *Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible*. Springer Verlag, MATHématiques et Applications, vol. 30, 1998.
- [91] Samimy, M., Elliot, G. S. *Effect of compressibility on the characteristics of free shear layers*. AIAA Journal **28**, pp 439-445, 1990.
- [92] Sandham, N.D., Reynolds, W.C. *Some inlet-plane effects on the numerically simulated spatially-developing mixing layer*. in Turbulent Shear Flows **6**, 1987.

- [93] Sandham, N.D., Reynolds, W.C. *Compressible mixing layer : linear theory and direct simulation*. AIAA Journal **28**, n°4, pp 618-624, 1990.
- [94] Schlichting, H. *Boundary-layer theory*. Sixth Edition, Mc Graw-Hill, 1968.
- [95] Schumann, U. *Direct an large eddy simulation of turbulence - summary of the state-of-the-art*. Von Karman Lecture Series 1991-02, 1991.
- [96] Schweitzer, C., Schley, C.-A. *H₂/O₂ rocket combustor flow field modeling, simulation and analysis*. Proc. of the 33rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, AIAA, Seattle, Vol. 97-3300, 1997.
- [97] Shu, C.W. *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*. NASA/CR-97-206253, ICASE Report No. 97-65, 1997.
- [98] Shyy, W., Chen, M.H., Mittal, R., Udaykumar, H.S. *On the suppression of numerical oscillations using a non linear filter*. J. Comp. Phys. **102**, pp 49-62, 1992.
- [99] Silvestrini, J. *Simulation des grandes échelles des zones de mélange ; application à la propulsion solide des lanceurs spatiaux*. Thèse INPG, 1996.
- [100] Smagorinsky, J. *General circulation experiments with the primitive equations. I : The basic experiment*. Month. Weath. Rev., textbf91(3), 99-165, 1963.
- [101] Steiner, H., et Bushe, W. K. *LES of non-premixed turbulent reacting flows with conditional source term estimation*. Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs 1998.
- [102] Sterling, T. L., Salmon, J., Becker, D. J., et Savarese D. F. *How to Build a Beowulf*. The MIT Press, Scientific and Engineering Computation Series, 1999.
- [103] Stoessel, A., Hilka, M., Baum, M. *Parallel direct numerical simulation of turbulent reactive flow*. in Direct numerical simulation for turbulent reactive flows, T. Baritaud, T. Poinso, M. Baum, Editions TECHNIP, 1996.
- [104] Stoukov, A. *Etude numérique de la couche de mélange réactive supersonique*. Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen, 1996.
- [105] Thompson, K.W. *Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems*. J. Comp. Phys. **68**, pp 1-24, 1987.
- [106] Ting, L., Ruger, C.J. *A note on the mixing of two parallel subsonic streams*. J. Math. Phys. **46**, pp 343-348, 1967.
- [107] Trefethen, L.N. *Numerical computation of the schwarz-christoffel transformation*. Siam J. Sci. Stat. Comp. **1**, pp 82-102, 1980.
- [108] Urbin, G. *Etude numérique par simulation des grandes échelles de la transition à la turbulence dans les jets*. Thèse INPG, 1998.
- [109] Vasilyev, O. *On the construction of high order finite difference schemes on non-uniform meshes with good conservation properties*. Center for Turbulence Research. Annual Research Briefs 1998.
- [110] Van Kalmthout, E., Poinso, T., Veynante D. *Stabilization processes of diffusion flames*. in Direct Numerical Simulation for Turbulent Reacting Flows ed. Technip Paris, 1996.
- [111] Vignau, F. *Etude théorique et expérimentale de la transition en écoulement bidimensionnel compressible*. Thèse de l'ENSAE, 1989.

-
- [112] Vreman, B. *Direct and large-eddy simulation of the compressible turbulent mixing layer*. PhD thesis, Dept. of Applied Math., University of Twente, 1995.
- [113] Vreman, B., Guerts, B., et Kuerten, H. *Comparison of subgrid-models in Large Eddy Simulation of the temporal mixing layer*. Memorandum No. 1243, University of Twente.
- [114] White, F.M. *Viscous fluid flow*. McGraw-Hills, 1974.
- [115] Whitham, G.B. *Linear and non linear waves*. John Wiley & sons, N.Y., 1974.
- [116] Yoshizawa, A. *Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling*. Phys. Fluids, textbf29, pp 2152-2164, 1986.

Résumé

Étude théorique et numérique des écoulements cisailés libres à masse volumique fortement variable

L'objet de ce travail concerne l'application de la méthode de simulation des grandes échelles au mélange de deux fluides à propriétés thermodynamiques différentes.

L'origine des erreurs numériques liées à la discrétisation des équations de Navier-Stokes ainsi que leur interaction avec un modèle sous-maille sont étudiées pour une turbulence homogène et isotrope en auto-amortissement. Un code de calcul à haut pouvoir de résolution est alors développé pour la simulation de couches de mélange bi-espèces. La réduction de l'amplitude des ondes acoustiques initiales est assurée par l'utilisation d'un champ en similitude temporelle.

L'importance relative des termes sous-maille issus des équations filtrées est mesurée à partir du filtrage explicite des champs de simulations numériques directes des couches de mélange temporelles N_2/O_2 et H_2/O_2 . L'utilisation d'une fermeture implicite autour d'un schéma numérique dissipatif est ensuite évoquée.

Mots-clés: simulation des grandes échelles, simulation numérique, couche de mélange, stabilité linéaire, différences finies, WENO, écoulement compressible.

Abstract

Theoretical and numerical study of free shear flows with large density ratio

The subject of this work concerns the application of large-eddy simulation to the mixing of two fluids with different thermodynamical properties.

Numerical errors in the discretisation of Navier-Stokes equations and their interaction with subgrid models are investigated on a self decaying isotropic homogeneous turbulence. A high resolution numerical code is then developed for the simulation of binary mixing layers. Reduction of early acoustic waves' amplitude is achieved by use of a temporal self-similar initial condition.

The relative magnitude of subgrid terms arising from filtered equations is investigated on explicit filtering of direct numerical simulation results of temporal N_2/O_2 and H_2/O_2 mixing layers. Implicit closure (MILES) is then evocated on the basis of WENO schemes.

Keywords: large eddy simulation, numerical simulation, mixing layer, linear stability, finite differences, WENO, compressible flow.