



Détection des grandes structures turbulentes dans les couches de mélange de type Rayleigh-Taylor en vue de la validation de modèles statistiques turbulents bi-structure

Romain Watteaux

► To cite this version:

Romain Watteaux. Détection des grandes structures turbulentes dans les couches de mélange de type Rayleigh-Taylor en vue de la validation de modèles statistiques turbulents bi-structure. Mathématiques générales [math.GM]. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2011. Français. NNT : 2011DENS0035 . tel-00669707

HAL Id: tel-00669707

<https://theses.hal.science/tel-00669707>

Submitted on 13 Feb 2012

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.

T H È S E

pour obtenir le titre de

Docteur en Sciences

de l'École Normale Supérieure de Cachan

Domaine : **MATHÉMATIQUES ET SCIENCES PHYSIQUES**

présentée et soutenue à Cachan le 21 septembre 2011 par

Romain WATTEAUX

Sujet :

**Détection des grandes structures turbulentes
dans les couches de mélange de type Rayleigh-Taylor
en vue de la validation
de modèles statistiques turbulents bi-structure**

Jury :

<i>Président :</i>	Bertrand AUPOIX	- ONERA (Toulouse)
<i>Rapporteurs :</i>	Pierre COMTE	- ENSMA (Poitiers)
	Denis VEYNANTE	- ECP (Paris)
<i>Examineurs :</i>	Stuart DALZIEL	- UOC (Cambridge Angleterre)
	Olivier POUJADE	- CEA (Bruyères-le-Châtel)
	David YOUNGS	- AWE (Aldermaston Angleterre)
<i>Directeurs :</i>	Jean-Michel GHIDAGLIA	- ENSC (Cachan)
	Antoine LLOR	- CEA (Bruyères-le-Châtel)

Centre de Mathématique et de Leurs Applications
ENS CACHAN/CNRS/UMR 8536

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes directeurs de recherche Jean-Michel Ghidaglia et Antoine Llor pour m'avoir donné l'opportunité de travailler sur ce projet, qui s'est finalement concrétisé par cette thèse.

Un grand merci à Jean-Michel Ghidaglia pour son aide lors du développement du code numérique, me permettant de gagner un temps précieux.

Un immense merci à Antoine Llor pour toutes ces heures passées au téléphone à parler de physique en utilisant beaucoup de mots et peu de formules. Sa disponibilité et son expertise m'ont été d'une utilité inestimable, que ce soit pour la compréhension de cet étrange monde qu'est celui de la turbulence, ou que ce soit pour agrémenter ma boîte à outils mathématiques de marteaux analytiques, de tournevis statistiques ou encore de clés de 12 différentielles. Ces échanges fréquents m'ont assurément permis de faire le travail présenté ici en un temps raisonnable.

Un grand merci aussi à Olivier Pujade pour m'avoir aidé et aiguillé en début de projet à la fois pour le développement du code et pour la compréhension des instabilités de mélange.

Je tiens à remercier Mathieu Peybernes pour son aide sur la prise en main du code Surfer et sa méthode de parallélisation ; et un grand merci à Pierre Pailhories pour m'avoir fourni les données 2SFK et aidé à les dépouiller.

Et enfin je remercie John Redford pour son travail, sur le code et les corrélations statistiques, qui m'a fait gagner un temps loin d'être négligeable.

À vous tous, au delà du travail, je vous remercie pour votre accueil et sympathie, rendant les sessions de travail agréables et sans pression.

Je tiens ensuite à remercier tout le monde du CMLA pour leur accueil, leur bonne humeur et les petites sessions de vannes en tous genres, sans oublier les parties de pétanque !

Et finalement, du monde extérieur, je remercie mes parents pour leur aide et soutien et Diane pour sa présence, sa patience et ses corrections !

Résumé : Cette thèse a pour objectif de détecter les structures turbulentes aux grandes échelles présentes dans une couche de mélange de type Rayleigh-Taylor incompressible à faible nombre d'Atwood. Diverses grandeurs statistiques conditionnées par la présence de ces structures ont été obtenues, et il est désormais possible de les comparer avec les résultats des modèles statistiques turbulents dits bi-structure, tel le modèle 2SFK développé au CEA.

Afin de réaliser les simulations numériques directes du mélange turbulent, un code numérique tridimensionnel incompressible à densité variable a été développé. Ce code a été parallélisé dans les trois directions. Plusieurs méthodes de détection de structure ont été conçues et testées. Bien que toutes ces méthodes présentent différents intérêts, seule la plus efficace vis-à-vis de nos critères de détection a été gardée pour faire des simulations à forte résolution (plus d'un milliard de mailles, 1024^3).

Un filtrage temporel de la vitesse verticale est utilisé dans cette méthode de détection afin de :

1. corriger les distorsions dues aux points d'arrêt et zones de recirculation dans l'écoulement,
2. minimiser l'effet de la turbulence aux petites échelles et mieux mettre en évidence les grandes échelles,
3. introduire un effet mémoire permettant de prolonger la bimodalité du champ de détection depuis les zones laminaires extérieures jusqu'au centre de la zone de mélange turbulent.

Plusieurs simulations numériques directes 1024^3 ont été effectuées. Les résultats viennent conforter ceux obtenus avec le modèle bi-structure 2SFK et justifient une étude plus poussée des grandeurs statistiques en vue de sa validation.

Abstract : This thesis aims at detecting large-scale turbulent structures in incompressible Rayleigh-Taylor mixing layers at low Atwood number. Various statistical quantities conditioned by structure presence have been obtained and it is now possible to compare them with results from two-structure statistical turbulent models such as the 2SFK model developed at CEA.

In order to produce direct numerical simulations of the turbulent mixing, a three-dimensional, incompressible, variable-density numerical code was developed. This code is parallelized in the three directions. Several structure detection methods have been designed and tested. Although all these methods are of interest, only the most efficient with respect to our detection criteria has been retained for simulations at high resolution (over a billion cells, 1024^3).

A time filtering of vertical velocity is used in this method to :

1. correct distortions due to stagnation points and recirculation zones in the flow,
2. minimize small-scale turbulence effects and better highlight large scales,
3. introduce a memory effect in order to extend bimodality of the detection field from the external laminar zones up to the centre of the turbulent mixing zone.

Several direct numerical simulations at 1024^3 have been achieved. Results support those obtained with two-structure 2SFK model and justify further studies for its validation. 6.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	L'instabilité de Rayleigh–Taylor (IRT)	1
1.2	Du modèle statistique à la structure topologique	3
1.2.1	Modèles turbulents	3
1.2.1.1	Approche mono-fluide	3
1.2.1.2	Approche bi-fluide	4
1.2.2	Notion de structure cohérente en turbulence	5
1.2.3	Modèles de mélange turbulent bi-structures	7
1.2.3.1	Modèle turbulent 2SFK	7
1.3	Travail de thèse	8
1.3.1	Chapitre 2 : développement et vérification du code numérique TURMIX3D	9
1.3.2	Chapitre 3 : validation du code numérique TURMIX3D	9
1.3.3	Chapitre 4 : détection de structures dans le mélange turbulent d'une IRT	9
1.3.4	Chapitre 5 : étude des corrélations statistiques et comparaisons avec le modèle 2SFK	10
1.3.5	Chapitre 6 : Conclusion	10
2	Développement et Vérification de TURMIX3D	11
2.1	Développement de TURMIX3D	11
2.1.1	Équation de conservation de la masse	11
2.1.2	Équation de la quantité de mouvement	11
2.1.3	Condition d'incompressibilité avec diffusion moléculaire	12
2.1.4	Système d'équations résolu	12
2.1.5	Calcul du maillage et du pas de temps	12
2.1.6	Algorithme de résolution du système	13
2.1.6.1	Étapes de calcul	13
2.1.6.2	Solveur de pression	14
2.1.6.3	Stabilisation du solveur	14
2.1.7	Méthodes numériques de discrétisation en espace	15
2.1.7.1	Équation de conservation de la masse	15
2.1.7.1.a	Limiteur de pente	16
2.1.7.1.b	Schéma numérique décentré d'ordre 1 pour la densité	16
2.1.7.1.c	Schéma numérique upwind d'ordre 2 pour la densité	17
2.1.7.1.d	Calcul de la densité par méthode de splitting	18
2.1.7.2	Équation de conservation de la quantité de mouvement	18
2.1.8	Méthode numérique utilisée pour la discrétisation en temps	19
2.1.9	Condition CFL vitesse/accélération	20
2.1.10	Paramètres d'entrée et ajustement dans le temps des autres paramètres	21
2.1.11	Création de la surface initiale selon le spectre d'énergie	22
2.2	Parallélisation 3D	22
2.3	Vérification du code	22
2.3.1	Vérification du schéma d'ordre 2 dans l'espace	23
2.3.1.1	Impact du limiteur sur l'advection	25
2.3.1.2	Impact de la méthode de splitting sur l'advection	29
2.3.1.3	Impact du maillage sur l'advection avec limiteur SuperBee	30

2.3.1.4	Impact de la condition de CFL sur l'advection avec limiteur SuperBee	30
2.3.1.5	Comportement du schéma pour une instabilité monomode	34
2.3.1.6	Conclusion sur la vérification du schéma d'ordre 2 en espace	34
2.3.2	Vérification du schéma d'ordre 2 en temps	36
2.3.2.1	Conclusion sur la vérification du schéma d'ordre 2 en temps	36
2.3.3	Vérification du code sur simulations d'instabilités turbulentes	39
2.3.3.1	Convergence par rapport à la longueur de maille	39
2.3.3.2	Convergence par rapport à la condition de CFL	39
3	Validation du code TURMIX3D	45
3.1	Les études monomode de Ramaprabhu et Dimonte	45
3.2	Réponse linéaire de l'alpha-group	47
3.3	Bilan et spectre d'énergie de Cabot et Cook	51
3.4	Transfert d'énergie spectral de Cook et Zhou	54
3.5	Transfert d'énergie spectral dans une instabilité monomode	58
3.5.1	Conclusion	61
4	Détection de structures	63
4.1	Que voulons nous détecter ?	63
4.1.1	Structures turbulentes dans le mélange turbulent d'une instabilité de Rayleigh-Taylor	63
4.1.2	Propriétés d'une structure cohérente	65
4.2	Comment pouvons-nous les détecter ?	67
4.2.1	Critères des méthodes existantes	67
4.2.2	Critères des méthodes développées pour notre cas d'étude	68
4.2.2.1	Choix de la fonction ϕ_s	69
4.2.2.2	Coefficient de bimodalité	70
4.2.2.3	Choix de la limite Φ_s^{lim}	71
4.2.3	Simulations numériques effectuées pour l'étude des méthodes de détection	72
4.3	Méthodes non-intrusives : utilisation des champs instantanés u' et ρ'	73
4.3.1	Résumé de l'approche	73
4.3.2	Détection avec $\phi_s = u' = u_z - \overline{u_z}$	73
4.3.2.1	Maximisation de l'énergie dirigée k_d	73
4.3.2.2	Topologie du champ de structures	74
4.3.2.3	Fonction de distribution et bimodalité	74
4.3.3	Détection avec $\phi_s = \rho' = \rho - \bar{\rho}$	75
4.3.3.1	Topologie du champ de structures	75
4.3.3.2	Fonction de distribution et bimodalité	75
4.4	Limites de l'utilisation de champs instantanés : ...	82
4.4.1	Imperfection topologique du champ de structures	82
4.4.2	Faible répartition statistique bimodale	82
4.4.3	Conclusion	82
4.5	Méthodes intrusives : filtrage temporel	83
4.5.1	Optimisation du filtrage temporel	84
4.5.2	Résumé de l'approche	86
4.5.3	Détection avec $\widetilde{\phi}_s = \widetilde{u}'$	87
4.5.3.1	Profils des paramètres à bimodalité $\beta^{u'}$ optimale	87
4.5.3.2	Topologie du champ de structures	87
4.5.3.3	Fonction de distribution	88
4.5.4	Détection avec $\widetilde{\phi}_s = \widetilde{\rho}'$	88

4.5.4.1	Profiles des paramètres optimisés pour une bimodalité $\beta\rho'$ optimale . .	88
4.5.4.2	Topologie du champ de structures	88
4.5.4.3	Fonction de distribution	89
4.6	Profiles de variables conditionnées par les structures et premières comparaisons avec le modèle 2SFK	90
4.6.1	Fraction volumique	90
4.6.2	Densité	90
4.6.3	Vitesse	91
4.6.4	Termes d'énergie	91
4.6.5	Termes de travail de la traînée et de Rayleigh-Taylor	91
4.6.6	Conclusion	92
5	Comparaison des résultats des SND avec le modèle statistique 2SFK	99
5.1	Moyennes conditionnées par les champs de structures	99
5.1.1	Équations non-moyennées	99
5.1.2	Équations 2SF moyennes conditionnées	100
5.2	Simulation 512^3 d'une instabilité de Rayleigh-Taylor avec détection de structures par vitesse filtrée	102
5.3	Quantités importantes et corrélations statistiques pour la comparaison SND/2SFK . .	103
5.3.1	Surface inter-faciale	103
5.3.2	Coefficient de mélange bi-structure	105
5.3.3	Fractions volumiques, densité et vitesses des structures	106
5.3.4	Terme d'échange de volume inter-structures	108
5.3.5	Énergies et transferts/productions d'énergie	110
5.3.5.1	Énergie (carrés)	110
5.3.5.2	Transferts/productions d'énergie (ellipses)	113
6	Conclusion	115
6.1	Bref rappel du travail réalisé	115
6.2	Impact des résultats	115
6.3	Développements futurs	116
A	Étude de comportement du code TURMIX3D sur les super-calculateurs de l'IDRIS	117
A.1	Comportement du code face au raffinage	117
A.1.1	Comportement en séquentiel (1 processeur)	118
A.1.2	Comportement sur 16 processeurs	118
A.1.3	Comportement sur 64 processeurs	118
A.1.4	Conclusion	118
A.2	Comportement du code face au parallélisme	121
A.2.1	Comportement sur un maillage $64^2 \times 128$	122
A.2.2	Comportement sur un maillage $128^2 \times 256$	122
A.2.3	Comportement sur un maillage $256^2 \times 512$	122
A.2.4	Conclusion	122
B	Cimetière des méthodes de détection de structure	125
B.1	Version 1	125
B.2	Version 2	126
B.3	Version 3	127
B.4	Version 4	127
B.5	Versions 5 et 6	128

B.6	Version 7	129
B.7	Version 7bis	130
B.8	Version 8	130
B.9	Version 9	131
C	Bilan statistique des équations moyennées conditionnées	133
	Bibliographie	147

Introduction

Que se passe-t-il lorsque deux fluides soumis à une force gravitationnelle se mélangent ? Comme très souvent, bien que la question soit simple, la réponse ne l'est pas. Au delà du simple défi intellectuel, réussir à comprendre les phénomènes complexes qui entrent en jeu lors du mélange des fluides est une nécessité afin de résoudre les différents problèmes industriels dans lesquels ce processus est présent. Nous pouvons citer de manière non-explicite les industries chimiques et pétro-chimiques pour les mélanges liquide-liquide, les industries du transport pour les mélanges liquide-gaz dans les moteurs, les industries du nucléaire pour les mélanges liquide-vapeur dans les échangeurs, etc. Ces mélanges sont généralement induits par des configurations instables appelées instabilités hydrodynamiques. Ces instabilités sont aussi très étudiées en sciences de l'atmosphère [Brown 1969], en recherche nucléaire dans le cadre de la fusion par confinement inertiel FCI [Youngs 1992, Barnes 2002, Regan 2002] mais aussi en astrophysique pour l'étude des supernovæ [Cabot 2006].

Nous pouvons catégoriser les divers mélanges énoncés ci-dessus en trois instabilités hydrodynamiques « idéales » : l'instabilité de Rayleigh–Taylor [Rayleigh 1883, Taylor 1950], induite par un champ de gravitation inverse au gradient du champ de densité des deux fluides, l'instabilité de Richtmyer–Meshkov [Richtmyer 1960, Meshkov 1969], induite par une onde de choc traversant l'interface entre les deux fluides, et l'instabilité de Kelvin–Helmholtz [von Helmholtz 1868, Kelvin 1871], induite par une couche de cisaillement entre les deux fluides. Le travail présenté ici aborde l'instabilité de Rayleigh–Taylor, nous la présentons donc de façon plus détaillée.

1.1 L'instabilité de Rayleigh–Taylor (IRT)

Lorsqu'un fluide dit « lourd » de densité ρ_1 et un fluide dit « léger » de densité $\rho_2 < \rho_1$, soumis à une gravité $\mathbf{g}$, ont une interface commune et sont disposés tels que $\mathbf{g} \cdot \nabla \rho < 0$ (notation d'Einstein), le fluide léger pousse alors le lourd et la moindre perturbation à l'interface crée une configuration instable qui engendre le mélange des deux fluides (voir figure 1.1). Une fois l'instabilité initiée, de l'énergie potentielle est continuellement convertie en énergie cinétique par le déplacement du centre de masse, et le mélange évolue pour finalement remplir tout le volume et donner un fluide stratifié stable. La rapidité d'évolution de la zone de mélange dépend du contraste de densité initial représenté par le nombre d'Atwood :

$$A = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\rho_1 + \rho_2}. \quad (1.1)$$

Quelle que soit la perturbation donnée à l'interface, les non-linéarités vont être de plus en plus fortes et finalement rendre l'écoulement turbulent. Cette turbulence rend complexe l'analyse de l'instabilité. Aux grandes échelles, nous pouvons cependant schématiser le mélange sous forme d'« aiguilles » pour ce qui évolue suivant $\mathbf{g}$ et de « bulles » pour ce qui évolue en sens inverse. Pour une explication plus détaillée de l'IRT, le lecteur pourra se tourner vers [Sharp 1984].

Bien que cette instabilité fût découverte par Lord Rayleigh en 1883 [Rayleigh 1883], il a fallu attendre presque 70 ans pour que l'on trouve la première équation descriptive en régime non-turbulent des phénomènes mis en jeu dans le mélange [Taylor 1950] ; elle sera généralisée au régime turbulent par Read et Youngs [Read 1984, Youngs 1984]. Cette équation phénoménologique, appelée équation de flottaison-trainée (*buoyancy-drag equation* en anglais), décrit en 0-D l'évolution de la taille de zone

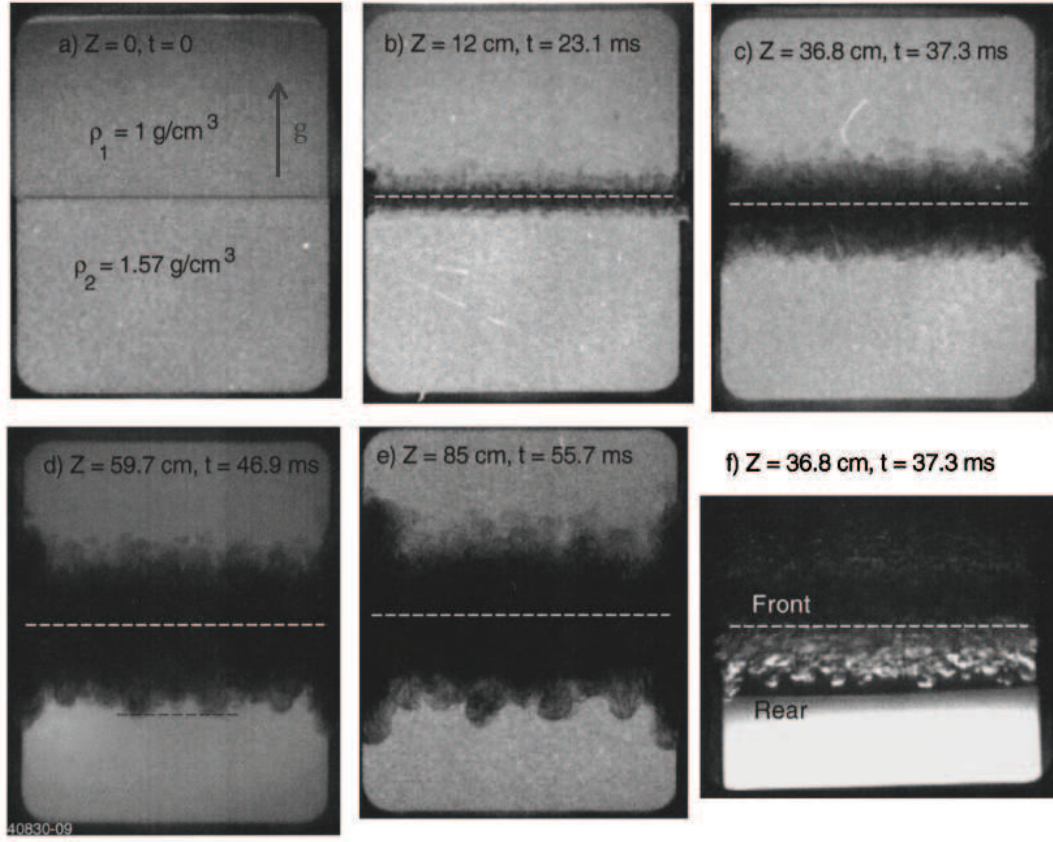


FIG. 1.1 – Ombroscopie d’une instabilité de Rayleigh-Taylor. Expérience de Dimonte et Schneider (reproduit de [Dimonte 1996]). La gravité est dirigée du fluide de densité ρ_2 (bas) vers le fluide de densité $\rho_1 < \rho_2$ (haut). En raison de perturbations à l’interface, il se produit alors le mélange turbulent.

de mélange $L(t)$ en fonction des forces en présence dans le mélange :

$$L'' = - \left(\frac{1}{2} + C_T \right) \frac{L'^2}{L} + C_F Ag \quad (1.2)$$

où C_T est le coefficient de traînée et C_F le coefficient de flottaison. Cette équation est la seule que l’on puisse construire en partant de l’épaisseur de la couche de mélange et de ses deux premières dérivées.

Depuis, de nombreuses contributions sur l’étude de l’IRT sont apparues. Nous pouvons citer de façon non-exhaustive les travaux de Allred [Allred 1953], Birkhof [Birkoff 1955], Lewis [Lewis 1950] et Chandrasekhar [Chandrasekhar 1961] dans les années 50 et 60, qui ont contribué à élargir les connaissances sur la phénoménologie de l’instabilité grâce à des expériences de laboratoire mais aussi à la théorie. Ces travaux traitent essentiellement du domaine linéaire de l’instabilité. Ensuite nous pouvons citer les travaux d’Andronov [Andronov 1976], Youngs [Youngs 1984], Read [Read 1984] et Sharp [Sharp 1984] dans les années 70 et 80 où l’on a vu apparaître les premières simulations numériques de mélange turbulent ainsi que les premières visualisations expérimentales de mélange turbulent grâce à la technique d’ombroscopie. Il est apparu de ces expériences et simulations que la taille de zone de mélange L évolue asymptotiquement suivant une fonction quadratique en temps :

$$L = \alpha Agt^2 \quad (1.3)$$

où α est appelé le coefficient de croissance et est constant. Quelle que soit la simulation ou expérience il apparaît que ce coefficient est toujours entre deux et trois fois plus grand dans les expériences ($\alpha \sim 0,1$) que dans les simulations ($\alpha \sim 0,04$). Les différentes raisons sont exposées dans [Dimonte 2004], la plus importante semblant être l’inévitable excitation aux grandes échelles dans les expériences qui est inexistante dans les simulations numériques. Enfin, l’explosion des capacités de calcul des ordinateurs a permis de faire de nombreuses études numériques tridimensionnelles de cette instabilité avec notamment les travaux de Youngs [Youngs 1991] (128^3 mailles) et [Youngs 1994] (270×160^2 mailles), de l’ α -group [Dimonte 2004] (512×256^2 mailles), et de Cook et Cabot [Cabot 2006] (3072^3 mailles), sans oublier l’apport continu de nouvelles données expérimentales grâce aux travaux d’Andrews [Banerjee 2006] et de Dalziel [Dalziel 1999].

Tout ces résultats théoriques, expérimentaux et numériques ont ensuite permis la création de différents modèles turbulents.

1.2 Du modèle statistique à la structure topologique

1.2.1 Modèles turbulents

Parce qu’il est impossible d’obtenir une description complète du mélange que ce soit de façon théorique, expérimentale ou numérique, l’élaboration de modèles turbulents est capitale pour la résolution des divers problèmes industriels et académiques cités en début de chapitre. Bien sûr, de nombreux modèles existent, utilisant diverses approches et donnant des résultats plus ou moins proches de l’expérience. La majorité de ces modèles utilisent l’approche dite « mono-fluide ». Celle-ci crée quelques incohérences dans le cadre des mélanges turbulents, ce qui a entraîné l’élaboration d’une approche dite « bi-fluide ». Pour obtenir plus de précision sur la comparaison de ces deux approches, le lecteur pourra consulter le livre de Llor [Llor 2005].

1.2.1.1 Approche mono-fluide

Dérivant des formalismes traditionnels de l’aérodynamique, l’approche mono-fluide fût la première utilisée pour modéliser les instabilités de mélange. Elle consiste à moyenner les équations de conservation de la masse, de quantité de mouvement et d’énergie en considérant le mélange comme un seul fluide de densité variable. Pour moyenner les équations et caractériser la turbulence, on utilise les fluctuations de Favre $\mathbf{u}''$ qui moyennent le champ étudié corrélé avec la densité :

$$u_j'' = u_j - U_j, \quad (1.4)$$

$$\overline{\rho u_j} = \overline{\rho} U_j. \quad (1.5)$$

La moyenne de Favre est la plus appropriée pour l’étude des mélanges car elle permet de vérifier la conservation de la masse et de la quantité de mouvement sans faire intervenir d’hypothèse de fermeture. Elle capture ainsi tout le transport des fluides. Il est à noter que bien que Favre ait le plus énergiquement défendu cette approche, il n’est pas le premier à l’avoir introduit. Lumley et Yaglom [Lumley 2001] expliquent en détail l’histoire de cette moyenne qui fût au départ appelée « moyenne par pondération de la densité » (*density-weighted average* en anglais). Cet historique oublie cependant la toute première définition de cette moyenne qui a été faite par Reynolds [Reynolds 1895].

De nombreux modèles utilisent l’approche mono-fluide. Le plus connu d’entre tous est le modèle $k - \varepsilon$, avec des fermetures complémentaires et des hypothèses phénoménologiques pour capturer les effets spécifiques aux mélanges à densité variable.

Malgré ces fermetures additionnelles, cette approche appliquée aux mélanges de type Rayleigh–Taylor engendre beaucoup d’incohérences et peut violer des principes essentiels comme le second principe de la thermodynamique [Llor 2005]. C’est pour tenter de résoudre ces problème qu’a été introduit le formalisme bi-fluide.

1.2.1.2 Approche bi-fluide

L'approche bi-fluide consiste à séparer les contributions physiques (masse, vitesse, énergie, etc.) des fluides lourd et léger présents dans le mélange. Il suffit pour cela de conditionner la moyenne des grandeurs décrites soit par la fraction massique du fluide lourd c^+ soit par la fraction massique du fluide léger c^- (avec $c^+ + c^- = 1$). Ainsi la quantité massique moyennée $A^\pm$ d'un champ physique a sera pour chaque fluide :

$$A^\pm = \frac{\overline{c^\pm \rho a}}{\overline{c^\pm \rho}}. \quad (1.6)$$

Les fluctuations de Favre $a^\pm$ caractérisent alors les fluctuations du champ local a par rapport à sa moyenne $A^\pm$:

$$a^\pm = a - A^\pm. \quad (1.7)$$

La séparation du mélange en deux champs $\pm$ implique que deux vitesses moyennes différentes $U^\pm$ sont désormais considérées. Une propriété importante induite par l'approche bi-fluide est alors l'apparition d'une vitesse dite d'interpénétration ou de glissement $\delta U = U^+ - U^-$, provenant du mouvement relatif du fluide $+$ par rapport au fluide $-$. Cette vitesse de glissement permet d'expliciter une contribution, que l'on dit « dirigée » [Llor 2003a], $k_d \approx (\delta U)^2/2$, de l'énergie cinétique turbulente mono-fluide. Comme nous le verrons plus loin cette énergie dirigée, cachée dans l'énergie cinétique turbulente avec l'approche mono-fluide, peut s'avérer conséquente et donc importante à considérer. En effet, de la même façon que sur une rivière, un bateau fixe par rapport à la berge dépense de l'énergie cinétique sans que cela ne se voit, ici le fluide $+$ dépense de l'énergie pour se déplacer par rapport à $-$ et inversement. Cette énergie dirigée est le terme qui relie l'approche mono-fluide à l'approche bi-fluide :

$$\overline{c^+ \rho (U^+)^2}/2 + \overline{c^- \rho (U^-)^2}/2 = \overline{\rho U^2}/2 + C^+ C^- \overline{\rho (\delta U)^2}/2 \quad (1.8a)$$

$$\overline{c^+ \rho (\mathbf{u}^+)^2}/2 + \overline{c^- \rho (\mathbf{u}^-)^2}/2 = \overline{\rho \mathbf{u}''^2}/2 - C^+ C^- \overline{\rho (\delta U)^2}/2 \quad (1.8b)$$

Entre les deux approches, il y a donc transfert d'une partie de l'énergie cinétique turbulente en faveur de l'énergie cinétique moyenne que nous appelons l'énergie dirigée et qui joue un rôle important dans la détermination des différentes caractéristiques physiques du mélange.

Youngs [Youngs 1984, Youngs 1994] fût un des précurseurs de cette approche en créant un modèle qui reste encore aujourd'hui un des meilleurs de ce type. Même celui-ci comporte tout de même plusieurs incohérences, notamment au niveau de la dissipation des fluctuations de concentration et du mélange des fluides à l'échelle moléculaire [Youngs 1996]. Ainsi, bien que l'approche bi-fluide apporte des améliorations certaines, elle ne remplit pas toutes les conditions nécessaires pour bien modéliser la turbulence d'une IRT.

Dès lors que ni le formalisme mono-fluide ni le formalisme bi-fluide, tout deux basés sur le champ de densité, ne nous permettent d'obtenir les résultats escomptés, nous pouvons nous demander si le concept d'un mélange guidé par le champ de densité s'avère être le bon. Les travaux de l' α -group [Dimonte 2004] ont mis en évidence cette indépendance entre la masse du fluide et le transport des grandes échelles turbulentes. Comme le montre la figure 1.2 (figure 24 de leur publication), nous voyons que l'IRT génère des « entités de transport » qui ne sont pas entièrement liés à la densité. Cette idée d'entité de transport, initialement introduite par Youngs [Linden 1994, Youngs 1996], peut aussi se déduire de l'équation phénoménologique de flottaison trainée 1.2. En effet, les coefficients de trainée C_T et de flottaison C_F soulèvent deux questions : sur quels « objets » s'appliquent ces coefficients de force, que l'on utilise généralement pour modéliser les contraintes que subit un corps dans un fluide ? Et le mélange ne pourrait-il finalement pas se découper aux grandes échelles sous forme d'entités

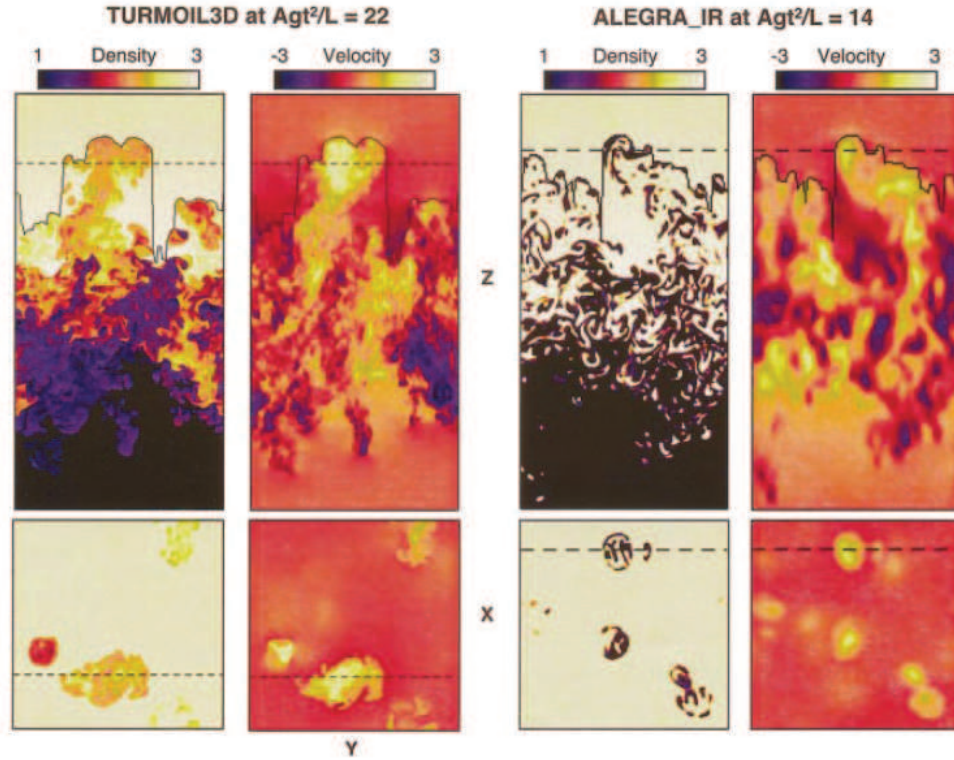


FIG. 24. (Color) Vertical and horizontal slices of density and vertical velocity in cgs units at $Agr^2/L \sim 22$ for TURMOIL3D and at ~ 14 for ALEGRA with IR. Dashed lines indicate position of complementary images.

FIG. 1.2 – Cartes de densité et de vitesse d’une IRT. Ici la gravité est dirigée vers le bas. La ligne noire délimite une entité de transport montante et met en avant sa densité hétérogène dans le cas miscible (code TURMOIL3D) comme dans le cas immiscible (code ALEGRAIR). Reproduit de [Dimonte 2004].

dans lesquelles les particules de fluides garderaient une cohérence autre que celle liée à la nature des fluides ?

Ces entités de transport sont déjà étudiées dans d’autres domaines de la turbulence. Bien que difficile à définir de part leur complexité, nous les trouvons le plus fréquemment sous le nom de « structures cohérentes ».

1.2.2 Notion de structure cohérente en turbulence

Nous ne sommes pas les premiers à nous poser la question de l’existence de structures cohérentes au sein d’un écoulement turbulent. L’idée est apparue après la seconde guerre mondiale avec les approches statistiques développées par Liepman [Liepmann 1952] et Townsend [Townsend 1956]. Ce dernier est le premier à expliquer que ces structures pourraient être détectées en étudiant les corrélations entre champs physiques dans le mélange. Cependant les intérêts scientifiques du moment ont fait que le sujet a été abandonné jusqu’à la fin des années 60 lorsqu’il a été repris par Lumley [Lumley 1967] dans le cadre de la turbulence atmosphérique et par Brown et Roshko [Brown 1971, Brown 1974] pour les couches de mélange cisailées. L’amélioration des techniques de visualisation des écoulements comme l’ombroscopie ont permis notamment à Brown et Roshko d’apporter de remarquables preuves visuelles d’une structuration de la turbulence à grande échelle (voir figure 1.3). Depuis, de nombreuses études ont été faites dans cette direction.

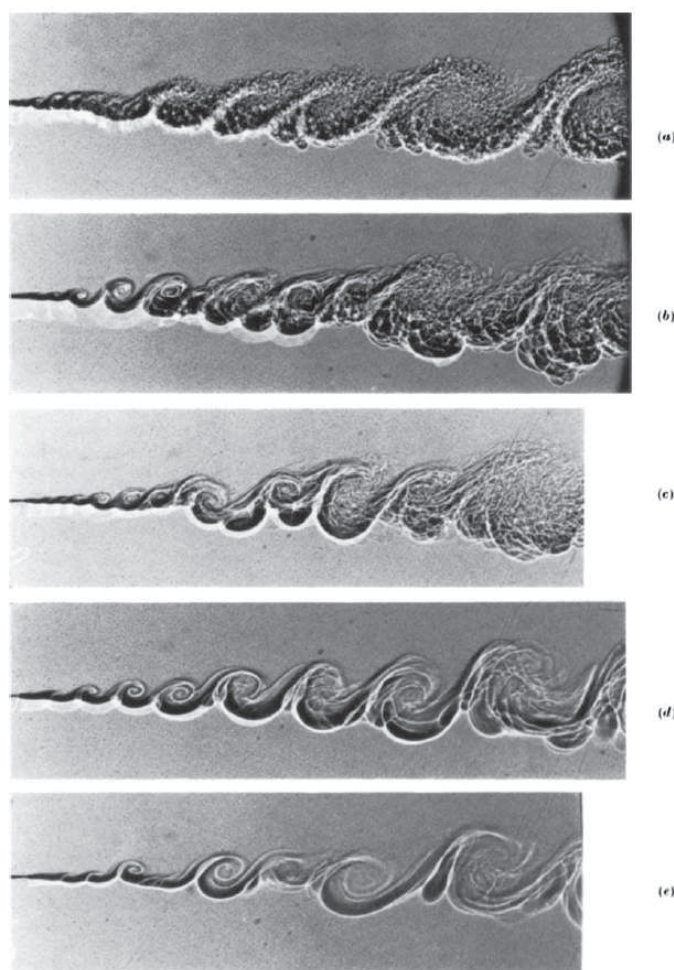


FIG. 1.3 – Ombroscopie d’une couche de mélange cisailé entre de l’hélium (haut) et de l’azote (bas) pour différents nombre de Reynolds. Du plus turbulent (a) au moins turbulent (e). Reproduit de [Brown 1974]. L’écoulement cisailé se structure à grande échelle sous forme de vortex, et cela même à grand nombre de Reynolds.

La complexité de la turbulence rend difficile une définition absolue de la notion de structure. Lumley [Lumley 1981, Lumley 1989] ou encore Liu [Liu 1988] exposent la diversité des opinions à ce sujet. Nous retenons pour l’instant la définition la plus générale des structures cohérentes qui a été donnée par Lumley :

«[...] a coherent structure is a pattern that recurs in the flow.»

Comme nous le verrons dans le chapitre 4, cette notion de récurrence est un aspect capital pour la détection des structures.

En plus d’une définition peu précise, il n’est pas encore bien compris non plus quel rôle pourrait jouer une structure. Nous pouvons citer Cantwell [Cantwell 1989, p.99] :

«There is a high degree of ambivalence toward organized structure; it is important, it is not; it is practical, it is academic. Methods for finding organized structure are put forward while at the same time the significance of the organized motion is called in question.»

Ainsi, le domaine des structures s’avère être un domaine dans lequel plusieurs approches concurrentes sont possibles. Que ce soit pour des raisons d’ordre pratique ou académique, un consensus semble

cependant établi selon lequel l'étude des structures est très importante si l'on veut mieux comprendre les phénomènes inhérents à la turbulence. Lumley estime d'ailleurs dans « *A Century of Turbulence* » [Lumley 2001] que la détection des structures cohérentes est l'une des priorités de la recherche sur la turbulence pour les années à venir.

Quelques travaux ont déjà parlé de structures cohérentes dans une IRT sans forcément les étudier en tant que telles. Ces dernières ont été désignées par les termes de « phases » par Youngs [Youngs 1996], « bulles » par Dimonte [Ramaprabhu 2005], « panaches » par Dalziel [Dalziel 1999], des « anneaux de vorticit   » par Moffatt [Moffatt 1990]. Nous les appelons des « structures turbulentes ». Ces d  finitions de structures appartiennent    celle plus g  n  rale des structures coh  rentes introduites par Lumley.

Cette notion de structure pourrait donc s'av  rer utile pour la mod  lisation statistique des m  langes turbulents. Il a   t   propos   qu'elle permet de corriger les incoh  rences qui apparaissent avec l'approche bi-fluide [Youngs 1996, Llor 2003b]. C'est dans cette optique que plusieurs mod  les dits bi-structures ont   t   cr   s.

1.2.3 Mod  les de m  lange turbulent bi-structures

L'int  r  t des structures du point de vue de la mod  lisation est aussi sujet    d  bat. Cantwell [Cantwell 1989, p.98] indique par exemple :

«It is pointed out that significant details of the mean flow are reproduced by the model [Shih, Lumley and Janicka [Shih 1987]] even though there has been no attempt to explicitly include the large eddies. This is contrary to views such as those expressed by Broadwell and Dimotakis (1986) [Broadwell 1986] who warn that models which do not explicitly or implicitly include the organized structure cannot capture features of the mean flow.»

Il n'existe donc pas de consensus quant    l'utilit   des structures du point de vue de la mod  lisation. Certains estiment que cette notion n'a qu'un int  r  t acad  mique, d'autres estiment au contraire qu'elle est indispensable pour une bonne mod  lisation de la turbulence.   tant donn   la difficult   que l'on rencontre pour d  finir de fa  on g  n  rique ce qu'est une structure, seules existent des d  finitions qui sont contextuelles. Ainsi, l'approche pr  sent  e dans cette th  se met en avant que les structures jouent un r  le majeur dans le m  lange et qu'elles doivent   tre prises en compte dans la mod  lisation. N  anmoins cette r  ponse ne s'applique bien s  r qu'aux IRT. Dans [Holmes 1997], Holmes regroupe et expose les travaux r  alis  s sur des mod  les turbulents prenant en compte les structures.

Des mod  les bi-structures tels que celui de Youngs [Youngs 1996] ou de Llor dit 2SFK [Llor 2003b] pourraient donc apporter quelques r  ponses au d  bat sur l'utilit   des structures dans le cadre des IRT, si ceux-ci am  liorent les r  sultats obtenus avec l'approche bi-fluide. Nous nous int  ressons ici au mod  le 2SFK.

1.2.3.1 Mod  le turbulent 2SFK

Le mod  le 2SFK repose sur le suivi simultan   des fluides et des structures turbulentes qui gouvernent la dynamique de la zone de m  lange. Dans le cas des IRT, ces structures sont responsables de la croissance de la zone de m  lange turbulent et peuvent   tre assimil  es aux bulles (structures montantes) et aiguilles (structures descendantes) visibles aux bords de la zone de m  lange. Elles sont mises en mouvement sous l'effet de la pouss  e d'Archim  de due    leurs diff  rences de densit  s effectives. Ces structures fluides pr  sentent une certaine forme de coh  sion propre explicable par le fait que la turbulence, aux grandes   chelles, produit une forme de viscosit   effective. En bord de zone de m  lange, la pr  sence de langues de fluide laminaire (entrant dans la zone) et de structures turbulentes (responsables de l'avanc  e du front de m  lange) sugg  re que les structures de densit  s diff  rentes se distinguent   galement par le contraste de turbulence. Comme le repr  sente sch  matiquement la figure 1.4, *il n'y a donc pas identit   entre structures et fluides* : les structures, par leur agitation turbulente,

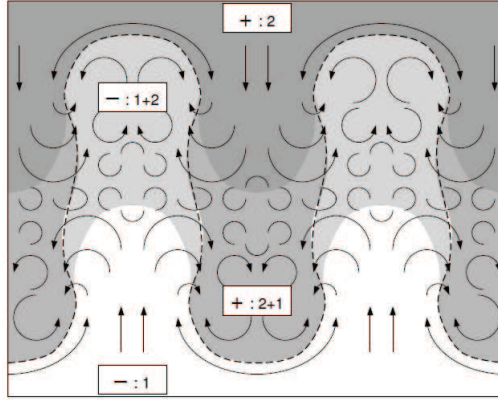


FIG. 1.4 – Représentation schématique de la zone de mélange turbulent pour une gravité dirigée vers le bas ; ligne pointillée : frontière de structure ; niveau de gris : niveau de fraction massique de fluide. Les structures descendantes sont appelées structures + et les structures montantes, structures -. Ces structures présentent une composition variable en fluides 1 et 2 : pures dans les zones laminaires et mélangées dans les bulles et aiguilles. Reproduit de [Llor 2003b].

maintiennent ensemble les fluides dont elles sont constituées, quels que soient le niveau et l'échelle des hétérogénéités, et le caractère miscible ou non miscible des fluides (voir figure 1.2).

Ces structures $\pm$ forment alors deux champs topologiques complémentaires du mélange turbulent qui sont à la base du modèle statistique 2SFK. On étudie désormais la physique du mélange non pas dans chaque fluide, avec sa fraction massique c^+ ou c^- , mais dans chaque structure avec leur fraction volumique b^+ ou b^- . Ainsi la quantité massique moyennée $A^\pm$ d'un champ physique a sera pour chaque structure + ou - :

$$A^\pm = \frac{\overline{b^\pm \rho a}}{\overline{b^\pm \rho}}. \quad (1.9)$$

Comme tout modèle, 2SFK comporte des fermetures. Les interactions entre structures turbulentes sont à la base de ce modèle de turbulence statistique, et la physique de ces interactions constitue le socle de ces fermetures. Cependant, à ce jour, aucune étude n'est venue confirmer ou infirmer les différentes approches choisies pour fermer le modèle. De plus, le concept de structure dans une IRT est récent et beaucoup de questions sont en suspens : que sont les structures dans une IRT ? Quelle définition rigoureuse pouvons-nous en donner ? Ces structures turbulentes sont-elles des structures cohérentes ? Comment se comportent-elles dans un mélange tri-dimensionnel ? Les échanges inter-structures contribuent-ils fortement à l'évolution globale de l'instabilité ? Autant de questions que nous nous posons et auxquelles nous apportons quelques éléments de réponse à travers de cette thèse.

1.3 Travail de thèse

Cette thèse décrit le travail effectué sur l'étude des structures dans une instabilité hydrodynamique de type Rayleigh-Taylor. Le caractère original du travail présenté ici réside dans l'étude physique des structures dans un mélange turbulent combinant une approche phénoménologique, topologique et statistique. L'utilisation de Simulations Numériques Directes (SND) nous a permis d'améliorer nos connaissances théoriques de la physique des structures en vue de calibrer et valider le modèle turbulent 2SFK. Trois jalons importants découpent ce projet : le développement d'un code numérique pour faire les SND (chapitres 2 et 3), l'élaboration de techniques de détection de structures tridimensionnelles

(chapitre 4), et enfin la création d'une base de données de résultats numériques pour faire une analyse physique du mélange turbulent et faire des comparaisons avec le modèle turbulent 2SFK (chapitre 5). Nous présentons ici brièvement les différents chapitres que forme cette thèse.

1.3.1 Chapitre 2 : développement et vérification du code numérique TURMIX3D

La première partie de ce mémoire présente le développement du code numérique TURMIX3D utilisé pour faire les SND, ainsi que sa vérification.

TURMIX3D est un code tridimensionnel, incompressible, visqueux, miscible, avec diffusion moléculaire et utilisant une méthode de parallélisation dans les trois directions pour pouvoir réaliser des SND à très grand nombre de mailles. Le code utilise une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 2 en temps et résout les équations de Navier-Stokes suivant une approche volumes finis d'ordre 2 avec des limiteurs de flux (Superbee, Minmod ou VanLeer). La résolution de l'équation se fait avec une décomposition « Lagrange + projection » de type Helmholtz-Hodge [Peyret 1983] en utilisant un solveur de pression multigrille V-cycle [Brandt 1982, Bri 1987, Press 1991] pour la partie projection de la vitesse.

Lorsque nous développons un code numérique, des erreurs peuvent survenir. Deux sources d'erreurs sont responsables des écarts possibles entre nos simulations numériques et celles disponibles dans la littérature : les méthodes numériques et la modélisation mathématique du phénomène physique. Pour contrôler notre code, nous procédons en deux étapes : d'abord la vérification ensuite la validation. La première étape permet donc de confirmer le bon fonctionnement du code numérique ainsi que sa bonne précision et est présentée dans ce chapitre. La deuxième étape est détaillée dans le chapitre suivant.

Après un exposé des différentes méthodes numériques utilisées, nous présentons le travail de vérification des méthodes numériques d'ordre 2 utilisées au travers de comparaisons avec l'ordre 1 et d'études de convergence. Les résultats sont positifs, avec un ordre d'environ 1,5. Les limiteurs de flux nous permettent de radicalement diminuer la diffusion numérique par rapport à un schéma d'ordre 1. Enfin, la parallélisation 3D permet de simuler sur super-calculateur des mélanges turbulents sur un maillage pouvant atteindre 2048^3 mailles.

1.3.2 Chapitre 3 : validation du code numérique TURMIX3D

Ce chapitre expose la phase de validation du code. Elle a consisté à reproduire avec notre code les différents résultats déjà publiés dans le domaine des IRT. Pour cela, nous nous sommes restreints à 5 publications différentes regroupant les aspects physiques importants d'un mélange de type Rayleigh-Taylor :

- l'évolution des perturbations mono-modes de Ramaprabhu & Dimonte [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006],
- la réponse linéaire de l' α -group [Dimonte 2004],
- le bilan énergétique et le comportement des spectres d'énergie de Cabot & Cook [Cabot 2006],
- les transferts énergétiques de Cook & Zhou [Cook 2002].

Le code se comporte très bien et permet de retrouver les divers résultats déjà publiés.

1.3.3 Chapitre 4 : détection de structures dans le mélange turbulent d'une IRT

Nous exposons ensuite les méthodes de détection de structures, à savoir la définition et le calcul des champs topologiques $b^\pm$, élaborées dans le cadre des IRT pour des simulations tridimensionnelles. Certaines de ces méthodes sont dites « non-intrusives », c'est-à-dire qu'elles ne nécessitent pas de

rajouter dans le code des modules de calcul, la détection se faisant en phase de post-traitement. Bien que très rapides, ces méthodes souffrent d'imperfections en raison du caractère turbulent de l'écoulement qui entraîne une mauvaise attribution des fluides aux champs $b^\pm$.

Pour améliorer cela, nous introduisons des méthodes dites « intrusives », c'est-à-dire qui nécessitent de rajouter des modules dédiés à la résolution d'une nouvelle équation mise en place pour la détection. Le concept important utilisé par ces méthodes est le *filtrage temporel*. Le caractère turbulent du mélange entraînant un comportement stochastique des champs physiques, l'emploi d'un filtrage temporel permet de réduire ces fluctuations aux petites échelles. De plus, cela permet d'augmenter le contraste en exploitant les différences « d'histoire » entre structures s'écoulant dans des directions opposées. En utilisant ensuite des méthodes d'analyse statistique, telles que l'optimisation des fonctions de distributions par l'utilisation de la méthode des sensibilités, nous obtenons une bonne séparation des structures montantes et descendantes. Le champ de structure tridimensionnel construit avec cette méthode est cohérent avec les champs physiques de densité en bord de zone de mélange et de vitesse dans toute la zone de mélange.

1.3.4 Chapitre 5 : étude des corrélations statistiques et comparaisons avec le modèle 2SFK

Une fois la détection réalisée, nous étudions la physique des mélanges en conditionnant les champs physiques avec le champ de structures. Cela permet de sélectionner des statistiques dans les seules structures montantes ou descendantes selon le cas. Nous présentons dans ce chapitre les résultats numériques obtenues par SND et les comparons à ceux trouvés avec le modèle turbulent 2SFK. La plupart des résultats numériques viennent valider qualitativement ceux du modèle. Nous pouvons cependant voir quelques différences, notamment au niveau des termes d'échanges de volume.

1.3.5 Chapitre 6 : Conclusion

Nous résumons le travail fait dans cette thèse et ouvrons le sujet sur de nouvelles questions pour un travail futur en vue de la validation du modèle 2SFK.

Développement et Vérification de TURMIX3D

Comme détaillé dans le premier chapitre, la Simulation Numérique Directe (SND ou *DNS* en anglais) est une nécessité incontournable pour faire de la détection de structure et valider le modèle statistique 2SFK. Les instabilités étudiées ici entrent dans le cadre des écoulements turbulents tridimensionnels, incompressibles avec diffusion moléculaire, visqueux et à densité variable. Nous avons dû alors développer un code numérique permettant de simuler des écoulements de ce type.

Ce chapitre présente notre code numérique TURMIX3D. La première partie expose le développement du code et la deuxième partie présente sa vérification.

2.1 Développement de TURMIX3D

TURMIX3D est un code tridimensionnel, incompressible avec diffusion moléculaire, visqueux et à densité variable. Comme nous le verrons, pour le développement de ce code nous avons utilisé certains modules du code *open source* SURFER [Lafaurie 1994].

2.1.1 Équation de conservation de la masse

Nous résolvons l'équation de continuité dans le cas d'une densité variable. Nous ne faisons donc pas de simplification et résolvons (notation de d'Einstein) :

$$\partial_t \rho + (\rho u_j)_{,j} = 0 . \quad (2.1)$$

Nous caractérisons alors le mélange de n fluides de densités constantes et uniformes ρ_i $i \in [1, n]$ en considérant leurs fractions volumiques α_i :

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i \alpha_i \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 . \quad (2.2)$$

Dans le cas bi-fluide comme dans une instabilité de Rayleigh–Taylor, nous avons alors :

$$\rho = \rho_2 + \alpha(\rho_1 - \rho_2) \quad \text{avec} \quad \alpha = \alpha_1 = 1 - \alpha_2 . \quad (2.3)$$

2.1.2 Équation de la quantité de mouvement

Soit le flux $F_i = \rho u_i$, l'équation de quantité de mouvement est alors dans notre cas :

$$\partial_t F_i + (F_i u_j)_{,j} = -p_{,i} + (\tau_{ij})_{,j} + \rho g_i, \quad (2.4)$$

avec p le champ de pression, g_i le champ de gravité, et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ij} = \rho \nu \left(u_{i,j} + u_{j,i} \right) - \frac{2}{3} \rho \nu (u_k)_{,k} \delta_{ij}. \quad (2.5)$$

où ν est le coefficient de viscosité cinématique.

2.1.3 Condition d'incompressibilité avec diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire entraîne une diffusion de la matière qui est décrite par une loi de Fick. La concentration massique $c = c_1$ du fluide 1, telle que $\frac{1}{\rho} = \frac{c}{\rho_1} + \frac{1-c}{\rho_2}$, est alors régie par l'équation suivante :

$$\partial_t(\rho c) + (\rho c u_j)_{,j} = (f_j^m)_{,j}, \quad (2.6)$$

où le flux de matière f_i^m suit la loi de Fick :

$$f_i^m = \kappa \rho c_{,i}, \quad (2.7)$$

où κ est le coefficient de diffusion moléculaire. Avec $\rho c = \rho_1 \alpha$ et ρ_1, ρ_2 constants, l'équation d'évolution de la fraction volumique est alors :

$$\partial_t \alpha + (\alpha u_j)_{,j} = \kappa \frac{\rho_2}{\rho_1 - \rho_2} \left(\frac{\rho_{,j}}{\rho} \right)_{,j}. \quad (2.8)$$

Afin de satisfaire les équations 2.1 et 2.8, comme $\rho = \rho_2 + \alpha(\rho_1 - \rho_2)$, nous devons donc avoir :

$$(u_j)_{,j} = -\kappa \left(\frac{\rho_{,j}}{\rho} \right)_{,j}. \quad (2.9)$$

Ainsi, comme on peut le voir, le caractère diffusif de la matière entraîne une divergence non-nulle de la vitesse effective différente de la condition d'incompressibilité classique $(u_i)_{,i} = 0$.

Nous ne faisons pas apparaître ce terme dans l'équation de conservation de la masse afin d'assurer une parfaite conservation de notre système, comme nous le verrons par la suite, la condition d'incompressibilité apparait alors, via la diffusion moléculaire, au niveau du solveur de pression.

2.1.4 Système d'équations résolu

Au vu des critères nécessaires à la bonne simulation d'un mélange bi-fluide, le système d'équations résolu numériquement est (avec $F_j = \rho u_j$) :

$$\text{Masse} \quad \partial_t \rho + (F_j)_{,j} = 0 \quad (2.10)$$

$$\text{Quantité de mouvement} \quad \partial_t F_i + (F_i u_j)_{,j} = -p_{,i} + (\tau_{ij})_{,j} + \rho g_i \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} &\text{Incompressibilité} \\ &\text{et Diffusion moléculaire} \end{aligned} \quad (u_j + \kappa \rho_{,j}/\rho)_{,j} = 0 \quad (2.12)$$

2.1.5 Calcul du maillage et du pas de temps

Nous utilisons un maillage cubique régulier de type MAC (« *Marker and Cell* ») [Peyret 1983]. Ce type de maillage permet d'avoir les paramètres de volume (densité et pression) au centre de la maille et les paramètres de flux (vitesses) en bord de maille (voir figure 2.1). Le maillage de type MAC présente l'intérêt, très utile en volume finis, de ne pas avoir à faire de moyenne pour obtenir les flux sur les surfaces. Il faut cependant gérer quatre référentiels différents $\rho(i, j, k)$, $u(i, j, k)$, et $v(i, j, k)$ et $w(i, j, k)$. Ainsi dans le référentiel de ρ , u est en $(i - 1/2, j, k)$, v est en $(i, j - 1/2, k)$ et w est en $(i, j, k - 1/2)$. De même, dans le référentiel de u , ρ est en $(i + 1/2, j, k)$ et w est en $(i + 1/2, j, k - 1/2)$ et ainsi de suite. On note h la taille de maille qui est déterminé par le nombre de nœuds suivant la direction x .

Le contrôle du pas de temps τ est un élément important pour optimiser la durée de calcul, nous utilisons donc une condition Courant–Freidrichs–Lewy (CFL), détaillée plus loin, pour calculer τ^n à chaque pas de temps.

Les équations sont adimensionnées par m_0, l_0, t_0 choisis par l'utilisateur.

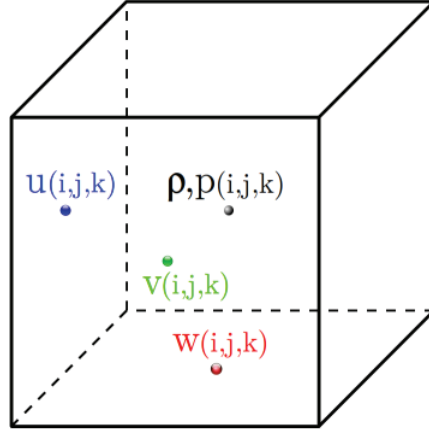


FIG. 2.1 – Maille élémentaire de type décentré MAC utilisée dans le code TURMIX3D. Les quantités volumiques (densité ρ et pression p) sont au centre et les quantités de flux (vitesses u , v , w) sont aux faces de la maille.

2.1.6 Algorithme de résolution du système

2.1.6.1 Étapes de calcul

On calcule tout d'abord la nouvelle densité ρ^{n+1} :

$$\rho^{n+1} = \rho^n - \frac{\tau^n}{h} F_{j,j}^n. \quad (2.13)$$

Puis, on calcule le nouveau flux $F_i^{n+1} = \rho^{n+1} u_i^{n+1}$ à partir de l'équation de quantité de mouvement de Navier-Stokes suivant une méthode de « Lagrange+Projection » avec une décomposition de type Helmholtz-Hodge [Peyret 1983] :

1. On passe par un flux intermédiaire F_i^{int} :

$$\frac{(F_i^{int} - F_i^n)}{\tau^n} = - (F_i^n u_j^n)_{,j} + (\tau_{ij}^n)_{,j} + \rho^n g_i. \quad (2.14)$$

2. On calcule le champ de pression p^n .
3. Finalement, on calcule le flux F_i^{n+1} :

$$\frac{(F_i^{n+1} - F_i^{int})}{\tau^n} = -p_{,i}^n. \quad (2.15)$$

Pour connaître p^n , on projète la solution F^{int} sur l'ensemble des solutions respectant la condition d'incompressibilité, ce qui revient à résoudre la divergence de l'équation 2.15 :

$$\frac{1}{\tau^n} (F_j^{n+1} - F_j^{int})_{,j} = -p_{,jj}^n, \quad (2.16)$$

or nous ne connaissons pas le terme $F_{j,j}^{n+1}$. Certaines méthodes ont été développées pour le calculer [Cook 1996], mais les résultats montrent que la résolution d'une telle équation dans le cadre d'écoulements à densité variable engendre des problèmes de convergence. Pour pallier ce problème, nous résolvons la divergence de l'équation 2.15 multipliée par $1/\rho^{n+1}$ [Nicoud 1998, Nicoud 2000], ce qui

donne :

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} p_{,j}^n \right)_{,j} &= \frac{1}{\tau^n} \left(\left(\frac{F_j^{int}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} - \left(\frac{F_j^{n+1}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} \right), \\
 &= \frac{1}{\tau^n} \left(\left(\frac{F_j^{int}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} - (u_j)_{,j}^{n+1} \right), \\
 &= \frac{1}{\tau^n} \left(\left(\frac{F_j^{int}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} + \kappa \left(\frac{\rho_{,j}^{n+1}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} \right). \tag{2.17}
 \end{aligned}$$

On obtient donc la pression p^n en résolvant l'équation 2.17.

2.1.6.2 Solveur de pression

La condition de convergence de la simulation numérique se fait sur la pression qui se calcule en résolvant l'équation 2.17 à l'aide d'un solveur de Poisson. Nous définissons l'opérateur $A^n(\cdot) = (1/\rho^{n+1}(\cdot))_{,j}$ et le membre de droite de l'équation mddⁿ qui est connu et dans lequel apparait la condition d'incompressibilité avec diffusion moléculaire. Le solveur doit résoudre alors l'équation :

$$A^n(p^n) = \text{mdd}^n. \tag{2.18}$$

Pour cela, nous avons utilisé le solveur de pression du code SURFER [Lafaurie 1994] qui calcule ce même opérateur A dans le cadre d'écoulements biphasiques non-miscibles. Ce solveur utilise la méthode de relaxation «Redblack Gauss-Seidel» associée à la méthode de convergence multigrilles «V-cycle» [Brandt 1982, Bri 1987, Press 1991].

2.1.6.3 Stabilisation du solveur

Écrit sous la forme 2.17, le solveur de pression ne converge pas pour des simulations multi-fluides à grand contraste de densité. L'introduction du terme de diffusion moléculaire engendre des problèmes de stabilité. En effet, si nous posons :

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{1}{\varepsilon}, \tag{2.19}$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0$, nous avons alors avec l'équation 2.3 :

$$\rho = \rho_1 (\varepsilon + (1 - \varepsilon)\alpha). \tag{2.20}$$

Pour regarder comment le terme de diffusion moléculaire $(\rho_{,j}/\rho)_{,j}$ converge lorsque ε tend vers 0, nous devons vérifier si son maximum converge. La divergence maximale se trouve à l'interface entre les deux fluides purs où se retrouvent côte à côte le gradient maximal (dans la transition de phase) et le gradient minimal qui est nul (dans une phase unique) :

- le gradient de la densité sera maximal lorsque la densité passe de ρ_2 à ρ_1 en une seule maille $\Delta x = h$:

$$\rho_{,j} \Big|_{\max} = \frac{\rho_1 - \rho_2}{h} = \rho_1 \frac{1 - \varepsilon}{h}, \tag{2.21}$$

- la valeur minimale de ρ est dans la phase unique de fluide léger soit ρ_2 :

$$\rho \Big|_{\min} = \rho_2 = \rho_1 \varepsilon, \tag{2.22}$$

- La valeur maximale de $(\rho_{,j}/\rho)$ est alors :

$$\left. \frac{\rho_{,j}}{\rho} \right|_{\max} = \frac{1}{h} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} . \quad (2.23)$$

- La divergence maximale est donc :

$$(\rho_{,j}/\rho)_{,j} \Big|_{\max} = \frac{(\rho_{,j}/\rho)_{\max} - 0}{h} = \frac{1}{h^2} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} . \quad (2.24)$$

Nous voyons que lorsque ε tend vers 0, la divergence maximale du terme de diffusion moléculaire tend vers l'infini, le solveur de pression ne peut alors converger. Pour supprimer la dépendance en $1/\varepsilon$ du terme de diffusion, on multiplie l'équation 2.17 par le terme correcteur $\rho_2/(\rho_1 - \rho_2)$, ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\rho_2}{\rho_1 - \rho_2} (\rho_{,j}/\rho)_{,j} \Big|_{\max} &= - \frac{\rho_2}{\rho_1 - \rho_2} \frac{\kappa}{h^2} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \\ &= - \frac{\rho_1 \varepsilon}{\rho_1 - \rho_1 \varepsilon} \frac{\kappa}{h^2} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \\ &= - \frac{\kappa}{h^2} . \end{aligned} \quad (2.25)$$

Le solveur de pression résout ainsi l'équation générale suivante :

$$\left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \left(\frac{\rho_2}{\rho_1 - \rho_2} p^n \right)_{,j} \right)_{,j} = \frac{\rho_2}{(\rho_1 - \rho_2) \tau^n} \left(\left(\frac{F_j^{int}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} - \kappa \left(\frac{\rho_{,j}^{n+1}}{\rho^{n+1}} \right)_{,j} \right) \quad (2.26)$$

Pour retrouver les variations physiques de la pression, il conviendra alors de diviser la pression obtenue par le terme correcteur.

2.1.7 Méthodes numériques de discrétisation en espace

Comme nous l'avons vu précédemment, nous utilisons un maillage décalé de type MAC (« *Marker and Cell* ») [Peyret 1983]. Les paramètres de volume ρ et p sont au centre des mailles élémentaires et les vitesses sont situées aux centres des faces (voir figure 2.1).

2.1.7.1 Équation de conservation de la masse

Pour obtenir la densité, nous utilisons un schéma décentré (« *upwind* » en anglais) à variation totale diminuante VTD (« *Total Variation Diminishing* » en anglais) [Harten 1984, Harten 1987] d'ordre 2 avec limiteur de pente. La vitesse étant variable, le terme de variation de flux $F_{j,j} = (\rho u_j)_j$ ne peut être simplifié si nous voulons conserver la masse. La discrétisation en schéma décentré prend la forme suivante (lorsqu'une seule composante est écrite, cela veut dire que les deux autres ne sont pas modifiées, ainsi $\rho_{i+1/2} = \rho_{i+1/2,j,k}$) :

$$\rho_{i,j,k}^{n+1} = \rho_{i,j,k}^n - \frac{\tau}{h} \sum_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \left[(\rho u_q)_{r+1/2}^n - (\rho u_q)_{r-1/2}^n \right] \quad (2.27)$$

Le maillage est décalé, nous avons alors le champ u_q en $r + 1/2$ car, comme nous pouvons le voir sur la figure 2.1, $(u_q)_r$ dans le référentiel de u_q est égale à $(u_q)_{r+1/2}$ dans le référentiel de ρ . Il suffit donc de déterminer la densité $\rho_{r+1/2}^n$. Pour cela nous utilisons un schéma avec limiteur de pente ϕ qui consiste à passer d'un schéma d'ordre 2 à un schéma d'ordre 1, si nécessaire lorsque nous devons traiter une discontinuité. Le schéma sur la densité prend la forme suivante au temps n :

$$\rho_{r+1/2}^n = \rho_{r+1}^{o1,n} + \phi_{r+1/2}^n (\rho_{r+1/2}^{o2,n} - \rho_{r+1/2}^{o1,n}) \quad (2.28)$$

Le maillage utilisé est cubique régulier, nous pouvons donc traiter chaque dimension de manière indépendante. Nous présentons les fonctions $\phi_{r+1/2}^n$ ainsi que les schémas numériques utilisés suivant la seule direction x , c'est-à-dire $r = i$. On appliquera ces schémas de la même façon suivant les deux autres dimensions $r = j, k$.

2.1.7.1.a Limiteur de pente

Pour traiter les discontinuité de densité, nous utilisons un limiteur de pente. Il a été démontré [?] qu'il est plus stable d'utiliser les informations de pente autour du point considéré plutôt qu'à gauche ou à droite du point. Si la vitesse $u_{i+1/2}$ est positive, nous regardons alors le rapport de pente $r_{i+1/2} = (\nabla \rho)_{i+3/2} / (\nabla \rho)_{i-1/2}$ et si la vitesse est négative nous utilisons le rapport inverse $1/r_{i+1/2}$.

$$r_{i+1/2}^+ = \frac{\rho_{i+2} - \rho_{i+1}}{\rho_i - \rho_{i-1}}, \quad (2.29)$$

$$r_{i+1/2}^- = \frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{\rho_{i+2} - \rho_{i+1}}, \quad (2.30)$$

$$r_{i+1/2} = \frac{r_{i+1/2}^+ + r_{i+1/2}^-}{2} - \text{sign}(u_{i+1/2}) \frac{r_{i+1/2}^+ - r_{i+1/2}^-}{2}. \quad (2.31)$$

Les trois limiteurs suivant sont implémentés dans le code :

– Limiteur « MINMOD » :

$$\phi_i(r_i) = \max(0, \min(1, r_i)). \quad (2.32)$$

– Limiteur « VAN LEER » :

$$\phi_i(r_i) = \frac{r_i + |r_i|}{1 + |r_i|}. \quad (2.33)$$

– Limiteur « SUPERBEE » :

$$\phi_i(r_i) = \max(0, \min(2r_i, 1), \min(r_i, 2)). \quad (2.34)$$

Ainsi, grâce au limiteur nous pourrons passer à l'ordre 1 lorsque nous serons confrontés à une discontinuité. Nous devons maintenant choisir quelle méthode d'ordre 1 ou 2 nous voulons utiliser. Nous prenons une approche de décentrement. Celle-ci consiste à aller chercher l'information physique en amont de l'écoulement. Cela signifie que pour le calcul de la densité en un point du maillage, nous prendrons l'information à gauche si la vitesse est positive et à droite si la vitesse est négative.

2.1.7.1.b Schéma numérique décentré d'ordre 1 pour la densité

Nous utilisons le schéma d'ordre 1 lorsque la valeur du rapport de pente r_i sort de son intervalle de validité déterminé par $\phi_i(r_i)$. Ce schéma consiste à estimer constante la densité dans la maille cubique élémentaire. Le décentrement impose que nous prenions toujours l'information en amont du point considéré : ainsi au point $i + 1/2$, la vitesse $u_{i+1/2}$ transporte une certaine quantité de fluide de densité ρ_i si $u_{i+1/2} > 0$ ou de densité ρ_{i+1} si $u_{i+1/2} < 0$. Comme le montre la figure 2.2, le flux considéré au point $i + 1/2$ peut se mettre sous la forme $F_{i+1/2}^{o1} = \rho_{i+1/2}^{o1} u_{i+1/2}$, avec

$$\rho_{i+1/2}^{o1} = \frac{\rho_{i+1} + \rho_i}{2} - \text{sign}(u_{i+1/2}) \frac{\rho_{i+1} - \rho_i}{2}. \quad (2.35)$$

Le schéma décentré d'ordre 1 est stable pour les équations de type conservation de quantité.

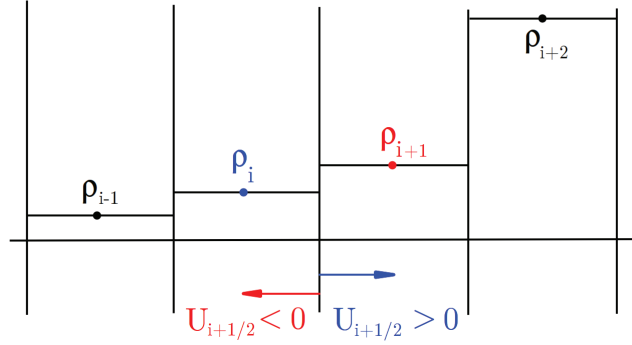


FIG. 2.2 – Schéma décentré d'ordre 1 pour le calcul de la densité. On récupère toujours l'information en amont du point de vitesse considéré.

2.1.7.1.c Schéma numérique upwind d'ordre 2 pour la densité

Nous utilisons un schéma d'ordre 2 appelé Schéma Monotone Amont-décentré pour les Lois de Conservation (SMALC) (plus connu sous l'éponyme anglais « *Monotonic Upstream-centered Schemes for Conservation Laws* » MUSCL) [Van Leer 1973, Van Leer 1974, Van Leer 1977a, Van Leer 1977b, Van Leer 1979] qui consiste à estimer que la quantité de fluide transportée en $u_{i+1/2}$ provient des variations amont de quantité de fluide. Mathématiquement, cela revient à projeter sur les faces la valeur de la densité amont suivant les variations amont. Comme le montre la figure 2.3, si $u_{i+1/2} > 0$, la densité est ρ_G et si $u_{i+1/2} < 0$, la densité est ρ_D . Les valeurs des densités ρ_G et ρ_D sont en fait respectivement la projection de ρ_i suivant le gradient $(\nabla \rho)_{i-1/2}$ et ρ_{i+1} suivant $-(\nabla \rho)_{i+3/2}$:

$$\rho_G = \rho_i + \frac{h}{2}(\nabla \rho)_{i-1/2} = \rho_i + \frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{2} \quad (2.36)$$

$$\rho_D = \rho_{i+1} - \frac{h}{2}(\nabla \rho)_{i+3/2} = \rho_{i+1} - \frac{\rho_{i+2} - \rho_{i+1}}{2} \quad (2.37)$$

On trouve ensuite la densité amont projetée grâce au signe de la vitesse :

$$\rho_{i+1/2}^{o2} = \frac{\rho_G + \rho_D}{2} - \text{sign}(u_{i+1/2}) \frac{\rho_D - \rho_G}{2}, \quad (2.38)$$

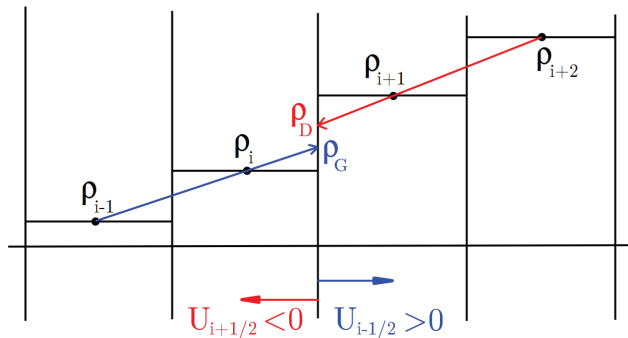


FIG. 2.3 – Schéma décentré d'ordre 2 pour le calcul de la densité. On récupère toujours l'information en amont du point de vitesse considéré en prenant aussi en compte les variations de densité amont.

2.1.7.1.d Calcul de la densité par méthode de splitting

Nous utilisons un maillage 3D régulier et structuré pour nos simulations numériques. La discrétisation dans l'espace de notre boîte de calcul est donc tridimensionnelle et dirigée suivant les axes x , y et z . Cette discrétisation peut poser des problèmes lorsque l'advection du fluide se fait suivant une direction quelconque non colinéaire aux axes. En effet, la décomposition de l'advection dans la base (x, y, z) va alors privilégier le déplacement de fluide suivant ces trois directions. Une méthode de splitting dans l'espace a été utilisée pour pallier ce problème. Nous alternons l'ordre des directions d'advection d'un pas de temps à l'autre. Le calcul étant tridimensionnel, nous avons donc $A_3^3 = 6$ arrangements possibles du triplet (x, y, z) . Nous assurons ainsi que l'advection de fluide se fait bien suivant le champ de vitesse physique et non suivant des processus numériques. Nous verrons cependant lors de la phase de vérification du code que la méthode de splitting n'est pas essentielle dans le cadre de l'étude de mélange turbulent.

2.1.7.2 Équation de conservation de la quantité de mouvement

Comme mentionné plus haut, le maillage est cubique régulier, l'approche volumes finis utilisée ici est alors équivalente à l'approche différences finies pour les termes non-couplés. Seul le terme de convection $(F_i^n u_j^n)_{,j} = \nabla \cdot (\mathbf{F}^n \otimes \mathbf{u}^n)$ nécessite donc un traitement particulier typique d'une approche volumes finis. Pour cela, nous utilisons l'algorithme développé pour le code SURFER et l'appliquons à notre cas. Cet algorithme consiste à intégrer le terme de convection sur le volume de notre maille élémentaire et utiliser le théorème de flux-divergence pour passer à une intégration sur les surfaces :

$$\mathbf{A} = \frac{1}{V} \int_{\partial V} \nabla \cdot (\mathbf{F} \otimes \mathbf{u}) dV = \frac{1}{V} \int_{\partial S} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS. \quad (2.39)$$

Cette intégration revient numériquement à sommer le terme de convection sur les 6 surfaces du cube :

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^3} \sum_{p=1}^6 \int_{S_p} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_p) dS_p. \quad (2.40)$$

Le terme de convection contribuant à faire varier les termes de flux F_i , il doit être centré sur celui-ci. Chaque A_i est donc calculé de façon à obtenir sa valeur au même endroit que F_i et donc que u_i ; comme le maillage est décalé, le volume d'intégration n'est donc pas centré sur le même point selon la direction i considérée, et S_p et $\mathbf{n}_p$ sont les 6 surfaces et normales du volume cubique d'intégration considéré (voir figure 2.4).

Comme notre maille élémentaire est cubique, alors $\mathbf{n}_2 = -\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_4 = -\mathbf{n}_3$ et $\mathbf{n}_6 = -\mathbf{n}_5$, ou encore $\forall j \in [1, 2, 3], \mathbf{n}_{2j} = -\mathbf{n}_{2j-1}$:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h^3} \left[\left(\int_{S_1} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_1) dS_1 - \int_{S_2} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_1) dS_2 \right) + \left(\int_{S_3} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_3) dS_3 - \int_{S_4} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_3) dS_4 \right) + \left(\int_{S_5} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_5) dS_5 - \int_{S_6} \mathbf{F}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_5) dS_6 \right) \right], \quad (2.41)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{h} \left[\begin{pmatrix} (F_1 u_1)_{S_1} - (F_1 u_1)_{S_2} \\ (F_2 u_1)_{S_1} - (F_2 u_1)_{S_2} \\ (F_3 u_1)_{S_1} - (F_3 u_1)_{S_2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (F_1 u_2)_{S_3} - (F_1 u_2)_{S_4} \\ (F_2 u_2)_{S_3} - (F_2 u_2)_{S_4} \\ (F_3 u_2)_{S_3} - (F_3 u_2)_{S_4} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (F_1 u_3)_{S_5} - (F_1 u_3)_{S_6} \\ (F_2 u_3)_{S_5} - (F_2 u_3)_{S_6} \\ (F_3 u_3)_{S_5} - (F_3 u_3)_{S_6} \end{pmatrix} \right]. \quad (2.42)$$

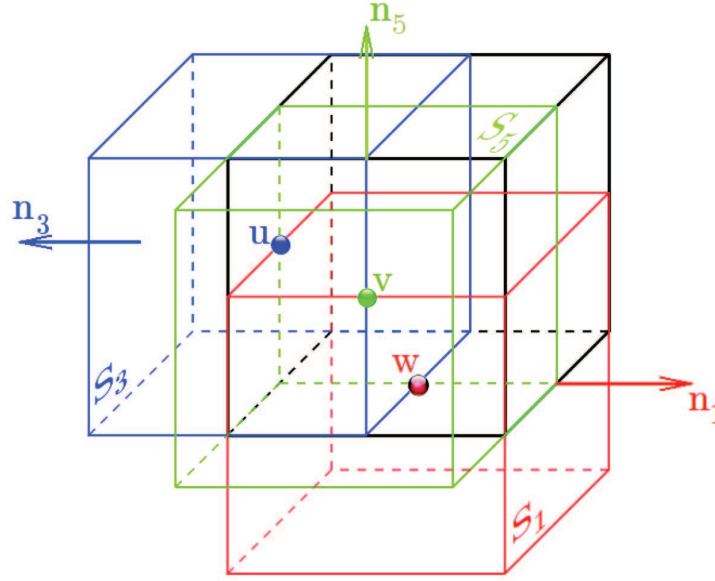


FIG. 2.4 – Volumes élémentaires d'intégration pour la méthode de volumes finis utilisée : en noir la maille élémentaire centrée sur les quantités de volume ρ et p . En bleu, vert et rouge les volumes d'intégration respectivement de $u_1 = u$, $u_2 = v$ et $u_3 = w$. Par souci de clarté, ne sont affichées que les normales $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_3$ et $\mathbf{n}_5$ des volumes respectivement rouge, bleu et vert.

Ainsi, pour chaque direction i , la contribution par convection au flux F_i est :

$$A_i = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^3 (F_i u_j)_{S_{2j-1}} - (F_i u_j)_{S_{2j}}. \quad (2.43)$$

Des calculs de moyenne sont donc nécessaires pour avoir les valeurs de vitesses u_i et F_i sur les faces S_j considérées.

2.1.8 Méthode numérique utilisée pour la discrétisation en temps

Nous utilisons une méthode « *Strong Stabilization Preserved Runge Kutta* » d'ordre 2 (SSPRK2) [Gottlieb 2001] pour le temps. Le concept de ce schéma est de calculer notre système d'équations au temps n sur deux pas de temps d'affilée pour obtenir une solution S'' puis de prendre la solution en $n+1$ comme barycentre des points S^n et S'' pondérés par une fonction des pas de temps utilisés. L'algorithme au temps n se décompose de la façon suivante :

1. On calcule le pas de temps τ_1 avec la solution $S^n = (\rho^n, u^n)$, puis on calcule la solution à $t + \tau_1$:

$$\tau_1 = \phi(CFL, u^n) \Rightarrow S' = S^n - f(\tau_1, S^n). \quad (2.44)$$

2. On calcule ensuite le pas de temps τ_2 avec la solution S' et ensuite la solution à $t + \tau_1 + \tau_2$:

$$\tau_2 = \phi(CFL, u') \Rightarrow S'' = S' - f(\tau_2, S'). \quad (2.45)$$

3. On obtient la solution à l'ordre 2 en temps en prenant la solution S^{n+1} comme solution pondérée des termes S^n et S'' :

$$S^{n+1} = \frac{2\tau_1\tau_2}{(\tau_1 + \tau_2)^2} S'' + \left(1 - \frac{2\tau_1\tau_2}{(\tau_1 + \tau_2)^2}\right) S^n. \quad (2.46)$$

4. Enfin, on met à jour le temps à $t = t + \tau$ avec :

$$\tau = \frac{2\tau_1\tau_2}{(\tau_1 + \tau_2)} \quad (2.47)$$

5. Le champ de pression est conditionné par les champs de vitesse via le solveur de pression. Il ne peut donc être approximé comme solution pondérée des champs de pression trouvés en 1. et 2. Une fois le pas de temps final τ déterminé, nous mettons donc à jour le champ de pression p^n en réutilisant le solveur avec les champs de vitesse au temps n et le pas de temps τ .

2.1.9 Condition CFL vitesse/accélération

Afin de diminuer le temps de calcul et d'assurer autant que possible la positivité, les pas de temps τ_1 et τ_2 sont contrôlés par une condition CFL. Dans le cadre de simulations d'écoulement avec discontinuités comme ici, la stabilité du schéma est conditionnée par son comportement en bord de discontinuité, c'est-à-dire là où les variations sont les plus grandes. Comme nous travaillons avec des limiteurs de pentes, ces zones seront traitées à l'ordre 1. Nous pouvons donc conditionner le pas de temps en étudiant l'équation de continuité à l'ordre 1. Si nous développons l'équation 2.27 en utilisant l'équation 2.28, nous obtenons l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+1} = & \left[1 - \sum_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \frac{\tau^n}{h} \left(\frac{|u_{q,r+1/2}^n| + |u_{q,r-1/2}^n|}{2} + \frac{u_{q,r+1/2}^n - u_{q,r-1/2}^n}{2} \right) \right] \rho_i^n \\ & + \frac{\tau^n}{h} \sum_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \left(\frac{|u_{q,r+1/2}^n| - u_{q,r+1/2}^n}{2} \right) \rho_{i+1}^n \geq 0 \quad (2.48) \\ & + \frac{\tau^n}{h} \sum_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \left(\frac{|u_{q,r-1/2}^n| + u_{q,r-1/2}^n}{2} \right) \rho_{i-1}^n \geq 0. \end{aligned}$$

Les deux derniers termes sont toujours positifs, nous regardons le comportement du premier terme. La vitesse maximale associée est :

$$U_{\max}^n = \max_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \sum \left(\frac{|u_{q,r+1/2}^n| + |u_{q,r-1/2}^n|}{2} + \frac{u_{q,r+1/2}^n - u_{q,r-1/2}^n}{2} \right) \quad (2.49)$$

La vitesse $U_{\max}^n$ sera maximale lorsqu'en une maille nous passons d'une particule de fluide en $r + 1/2$ de vitesse $u_{q,r+1/2}^n > 0$ à une particule en $r - 1/2$ de vitesse $u_{q,r-1/2}^n = -u_{q,r+1/2}^n$, ce qui donne :

$$U_{\max}^n = 2 \max_{\substack{(q,r)=(x,i); \\ (y,j);(z,k)}} \sum \left(|u_{q,r+1/2}^n| \right) \quad (2.50)$$

Le pas de temps τ^n conditionné par la CFL au temps n est alors :

$$\tau^n = \frac{h}{U_{\max}^n} \text{CFL}. \quad (2.51)$$

Initialement, le champ de vitesse est nul, les premiers pas de temps calculés sont alors beaucoup trop grands pour garder la stabilité du calcul. On détermine alors un pas de temps seuil $\tau_{\max}^n$ qui

correspond au pas de temps trouvé dans le cas d'une chute libre pondérée par la condition de CFL et le nombre d'Atwood $A = (\rho_1 - \rho_2)/(\rho_1 + \rho_2)$ qui représente le contraste de densité :

$$\tau_{\max}^n = \sqrt{\frac{\text{CFL}h}{A|g|}} \quad (2.52)$$

Le contrôle du pas de temps nous permet d'optimiser autant que possible le temps de calcul mais ne nous permet pas d'assurer une densité ρ comprise entre $\rho_{\min} = \rho_1$ et $\rho_{\max} = \rho_2$. En effet, l'équation 2.48 peut se mettre sous la forme :

$$\rho_i^{n+1} = \left[1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} U\right] \rho_i^n + \text{termes positifs ou nuls}, \quad (2.53)$$

et nous n'avons aucun moyen de contrôler les termes additionnels positifs ou nuls. Ainsi, lorsque $\rho_i^n = \rho_{\min}$, le coefficient devant ρ_i^n étant inférieur à 1, si les termes additionnels sont nuls, on obtient alors $\rho_i^{n+1} < \rho_{\min}$. À l'inverse lorsque $\rho_i^n = \rho_{\max}$, les termes positifs ou nuls peuvent rendre la densité supérieure à $\rho_{\max}$. Les dépassements engendrés par ces termes additionnels restent cependant faibles et ne jouent pas sur les résultats des simulations.

2.1.10 Paramètres d'entrée et ajustement dans le temps des autres paramètres

Avant de lancer une simulation numérique, plusieurs paramètres physiques doivent être définis par l'utilisateur :

- le nombre d'Atwood $At = (\rho_1 - \rho_2)/(\rho_1 + \rho_2)$,
- la densité du fluide lourd ρ_1 (on obtient alors la densité du fluide léger par $\rho_2 = \rho_1 \frac{1-A}{1+A}$),
- la gravité g_{z0} et sa variation dans le temps $nacc$ telle que $g_z = g_{z0}t^{nacc}$ (pour une instabilité de Rayleigh-Taylor, $nacc = 0$),
- la viscosité cinématique initiale ν_{init} , considérée comme étant la même pour les deux fluides,
- le nombre de Schmidt S_c qui nous permet ensuite de quantifier la diffusion moléculaire initiale par rapport à la viscosité cinématique, $\kappa_{\text{init}} = \nu_{\text{init}}/S_c$.

Dans le cadre des instabilités de Rayleigh-Taylor turbulentes, nous proposons de calibrer la viscosité cinématique de façon à toujours avoir l'échelle de dissipation 2,1 fois plus petite que l'échelle du maillage (Pope[Pope 2000], p.347). Pour cela, nous utilisons le comportement 0D de la zone de mélange. Dans le mélange turbulent, l'échelle de dissipation η est reliée à la dissipation de l'énergie cinétique turbulent E par la relation de Kolmogorov :

$$\eta(t) = \left(\frac{\nu^3(t)}{E(t)}\right)^{1/4}. \quad (2.54)$$

Le bilan d'énergie 0D donne au temps n :

$$E^n = \frac{1}{L} \frac{d}{dt} (LK_I - LK_T) \quad (2.55)$$

où K_p et K_t sont respectivement l'énergie potentielle injectée et l'énergie cinétique turbulente dans la zone de mélange et L la taille de la zone de mélange. Nous voulons qu'au temps $t = t^n$, l'échelle de dissipation soit $\eta = h/2.1$, cela donne la condition suivante pour la viscosité cinématique ν^n :

$$\nu^n = \left(\left(\frac{h}{2.1}\right)^4 E^n\right)^{1/3}. \quad (2.56)$$

Nous mettons ensuite à jour la diffusion moléculaire :

$$\kappa^n = \nu^n / S_c. \quad (2.57)$$

Du fait de l'adaptation de la viscosité cinématique en fonction du bilan 0D d'énergie et de la taille de maille, les simulations numériques faites avec ce code pourraient être considérées comme des simulations de type MILES [Boris 1992, Pope 2000] au lieu d'être de type DNS [Pope 2000]. Cette approche semble être en fait en marge des approches classiques et connues, mais ce débat n'ayant au final que peu d'impact sur le fond du travail de détection de structures, nous laissons au lecteur la possibilité de se faire sa propre opinion.

2.1.11 Création de la surface initiale selon le spectre d'énergie

Dans une instabilité Rayleigh-Taylor, la zone de mélange est initiée par les perturbations à l'interface entre les deux fluides. L'approche choisie ici est de perturber l'interface en densité. Cette interface est positionnée au milieu de la boîte en $z = 0$. Pour la générer, nous créons une surface initiale $\mathcal{S}_i$ dont l'amplitude représente la perturbation en densité autour de $z = 0$. Cette surface est définie par son spectre d'énergie dans l'espace réciproque 1D. Pour cela, nous utilisons la méthode suivante :

- On définit le spectre d'énergie voulu dans l'espace réciproque 1D : $E_k(k)$ où $k \in [1, \dots, m_x/2]$ est le nombre d'onde, et m_x est le nombre de mailles suivant la direction x .
- On obtient le spectre en amplitude $A_k(k) = \sqrt{E_k(k)/k_{onde}(k)}$ avec $k_{onde} = 2\pi/\lambda(k) = 2\pi/(H/k)$.
- On définit la matrice complexe 2D $Z(k_x, k_y)$ avec $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ qui définit notre surface dans l'espace réciproque : $Z(k_x, k_y) = \tilde{A}_k(k_x, k_y) \exp(i\phi(k_x, k_y))$, avec ϕ un champ de phase aléatoire entre 0 et 2π , et $\int_k^{k+1} \tilde{A}_k(k) d\sigma = A_k(k)$.
- On obtient alors la surface initiale en repassant dans l'espace réel $\mathcal{S}_i = \mathcal{R}(\mathcal{F}^{-1}(Z))$.

Plusieurs spectres sont proposés, le profil de l' α -group, le profil en chapeau, le bruit rose, le bruit blanc. Hormis pour l'étude de la réponse linéaire, les simulations numériques présentées ici ont été faites avec une surface initiale dont la surface $Z(k_x, k_y)$ est non-nulle sur un anneau spectral de rayon $[k_{\min} = 2\pi/(8h); k_{\max} = 2\pi/(4h)]$. L'amplitude de la surface est ajustée de façon à obtenir un écart type $\sigma = 0,02\lambda_{\min} = 0,02 \cdot 2\pi/k_{\min}$.

2.2 Parallélisation 3D

Le code TURMIX3D a été parallélisé dans les trois directions de calcul en reprenant l'algorithme 1D de type « *Message-Passing Interfac* » (MPICH) utilisé dans le code SURFER [Lafaurie 1994]. Il est possible de choisir le nombre de processeurs suivant chaque direction (NP_x, NP_y, NP_z) . Le nombre total de processeurs étant alors $NP_x \times NP_y \times NP_z$. La figure 2.5 montre le découpage de la boîte de calcul pour un découpage sur 64 processeurs, soit $(NP_x, NP_y, NP_z) = (4, 4, 4)$.

Le code a été porté sur les super-calculateurs de l'Institut du Développement et des Ressources en Informatique (IDRIS/GENCI) (les caractéristiques du code sur ces super-calculateurs sont présentées en Annexe A) ainsi que sur ceux du Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT). Cela nous a permis de faire des simulations de 1024^3 nœuds (1 milliard de nœuds) sur 512 processeurs.

2.3 Vérification du code

Une fois le code développé, il est important de s'assurer que les résultats qu'il fournit sont suffisamment précis. Deux sources d'erreurs sont possibles dans les simulations numériques : les méthodes

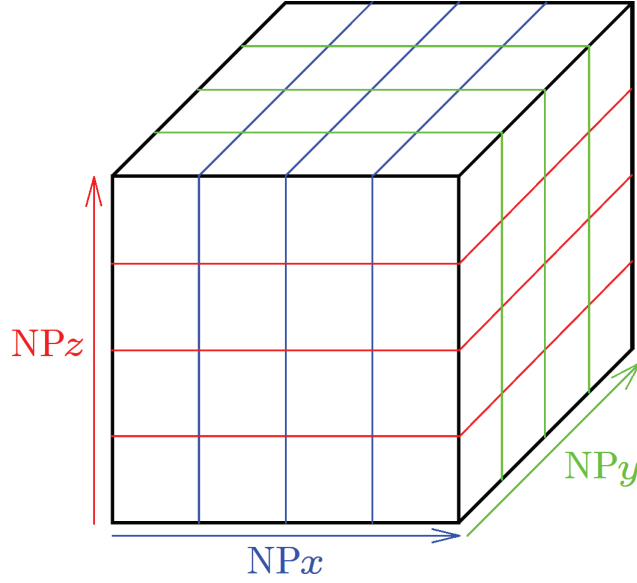


FIG. 2.5 – Parallélisation 3D de la boîte de calcul pour $(NP_x, NP_y, NP_z) = (4, 4, 4)$. Chaque sous-cube représente alors le domaine de calcul d'un processeur.

numériques et la modélisation mathématique du phénomène physique. Deux étapes sont alors nécessaires pour s'assurer du bien-fondé du code : l'étape de vérification puis celle de validation. La première permet de confirmer le bon fonctionnement du code numérique ainsi que la bonne convergence des calculs. La deuxième permet de confirmer la bonne modélisation des phénomènes physiques simulés. Nous nous intéressons ici à la vérification des simulations numériques. La phase de validation fait l'objet du prochain chapitre.

2.3.1 Vérification du schéma d'ordre 2 dans l'espace

Pour vérifier notre schéma d'ordre 2 en espace, nous étudions tout d'abord l'advection à vitesse constante d'une sphère de densité ρ_1 dans un milieu de densité ρ_2 (avec un nombre d'Atwood de 0,1) et comparons les résultats à une simulation à l'ordre 1. La boîte de calcul est un cube dont les conditions aux limites sont périodiques dans les trois directions. La vitesse des milieux est dirigée suivant une diagonale du cube comme le montre la figure 2.6 afin de vérifier aussi que le couplage des trois directions est bon.

Pour observer la diffusion de l'interface de la sphère, nous étudions la section diagonale qui passe au travers de la sphère. La figure 2.7 montre la section diagonale de la configuration initiale.

Bien sûr l'advection de la sphère va dépendre de plusieurs paramètres : les fonctions limiteurs, la condition de CFL et la méthode de splitting sur l'advection.

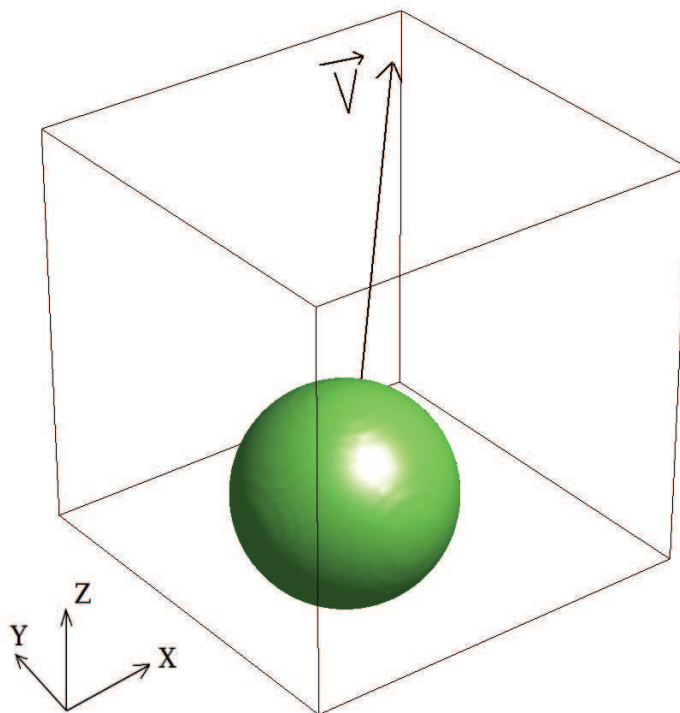


FIG. 2.6 – Dispositif initial du test d’advection d’une sphère. La sphère se déplace suivant la direction $(x, y, z) = (1, 1, 1)$ à une vitesse $\vec{V}$ constante.

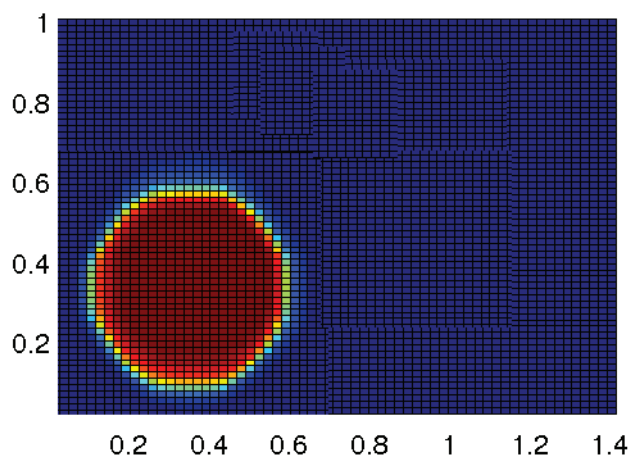


FIG. 2.7 – Carte de densité de la section diagonale de la boîte de calcul. On retrouve en rouge la section de la sphère présentée en figure 2.6.

2.3.1.1 Impact du limiteur sur l'advection

Le limiteur joue le rôle important de faire passer le calcul de la densité à l'ordre 1 lorsque nous sommes confrontés à une discontinuité. Nous étudions l'impact des limiteurs MinMod, Van Leer et SuperBee et comparons les résultats avec ceux d'un schéma d'ordre 1. Les figures 2.8, 2.9 et 2.10 montrent les résultats de l'advection après un déplacement d'une dizaine de nœuds. Comme nous pouvons le voir, après seulement quelques pas de temps, la sphère advectée à l'ordre 1 est déjà très diffusée. Le limiteur SuperBee minimise le plus la diffusion numérique, en contrepartie la circularité de la sphère est détériorée.

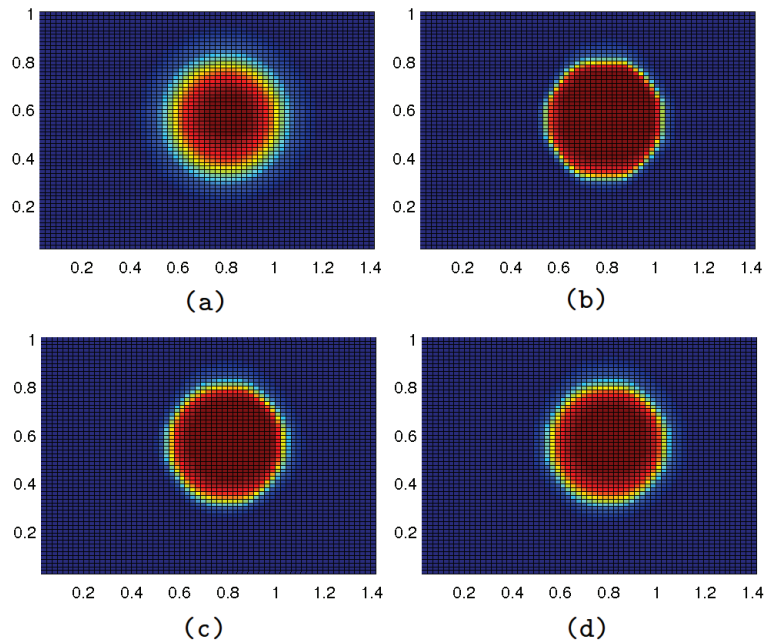


FIG. 2.8 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Le limiteur SuperBee est le moins diffusif et garde l'interface de bulle sur environ 6 mailles, par contre il donne une sphéricité assez détériorée.

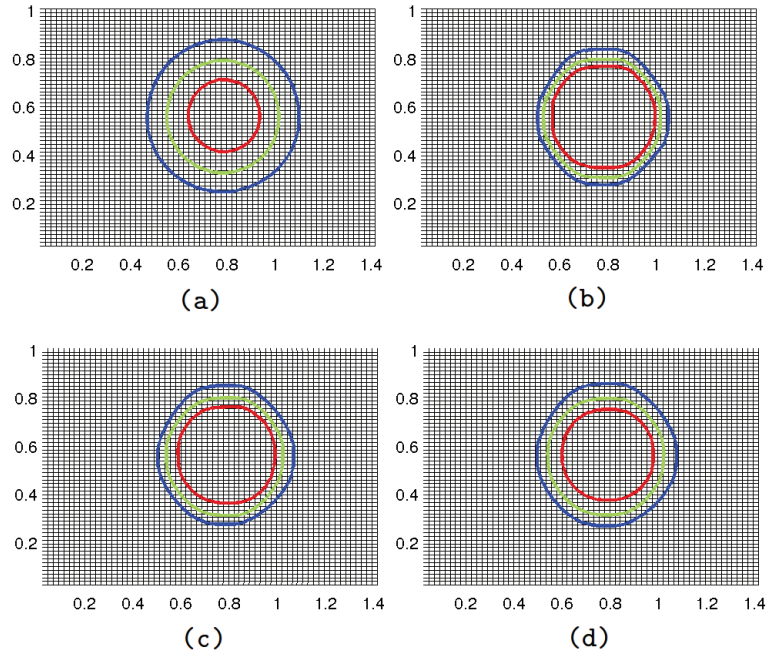


FIG. 2.9 – Contours de fractions volumiques $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.8.

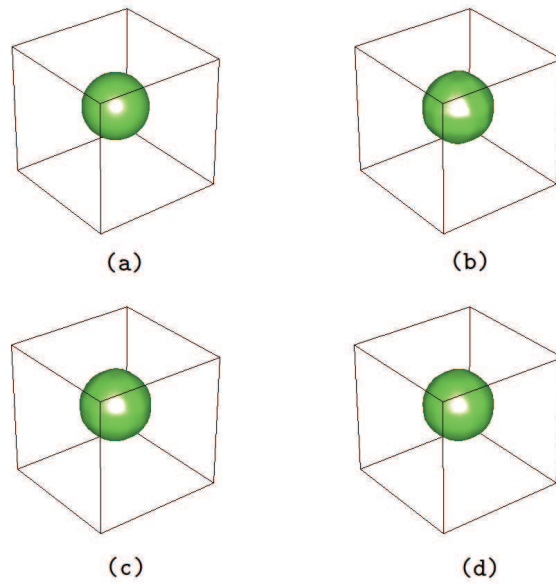


FIG. 2.10 – Isosurfaces de fraction volumique $c = 0, 5$ obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. On voit bien ici la perte de sphéricité avec le limiteur SuperBee précédemment exposée en figures 2.8 et 2.9.

Les figures 2.11, 2.12 et 2.13 montrent les résultats de l'advection de la sphère après deux traversées complètes de la boîte. Pour l'ordre 1, la diffusion est telle que seul le contour de fraction volumique $c = 0,1$ subsiste. Les limiteurs MinMod et VanLeer ont aussi généré beaucoup de diffusion numérique, seul le limiteur SuperBee assure une largeur constante d'interface.

Dans le cadre des études d'instabilités de mélange, nous devons limiter le plus possible la diffusion numérique afin que la diffusion se fasse essentiellement suivant le processus de diffusion moléculaire. Le limiteur SuperBee semble donc le plus approprié.

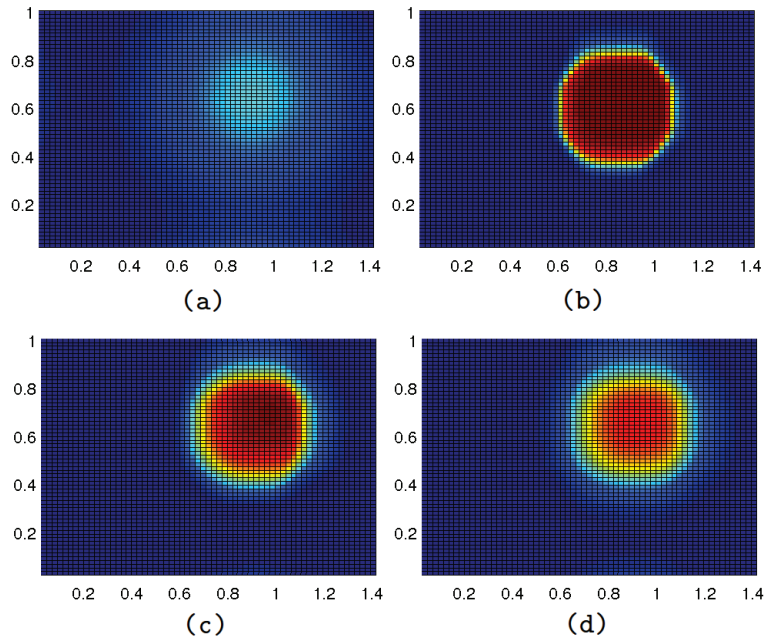


FIG. 2.11 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. La sphère a quasiment disparu à l'ordre 1 dû à une trop grande viscosité numérique. Seul le limiteur SuperBee assure une interface constante sur environ 6 mailles.

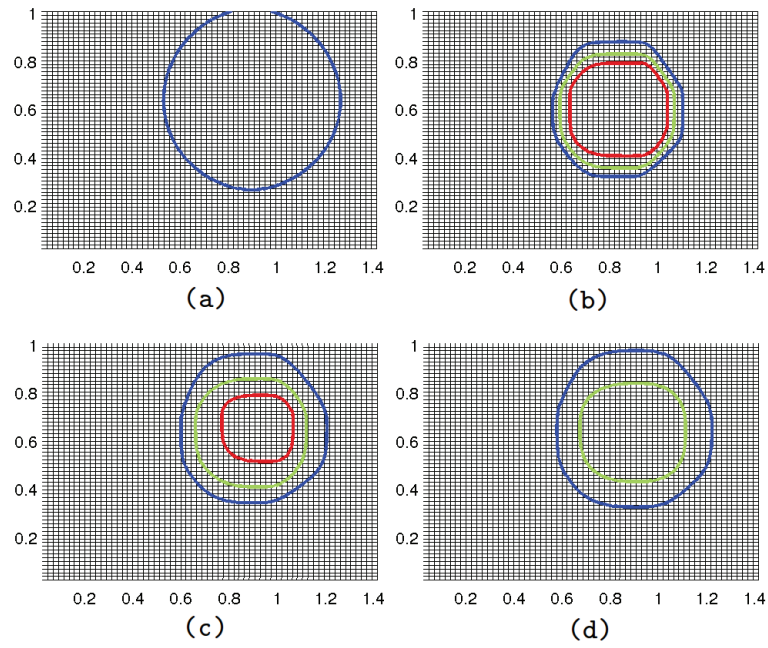


FIG. 2.12 – Contours de fraction volumique $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.11.

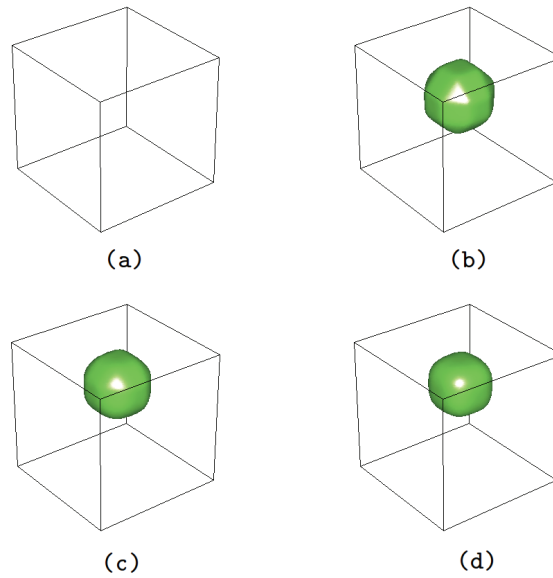


FIG. 2.13 – Isosurfaces de fraction volumique $c = 0, 5$ obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. On confirme les remarques exposées en figure 2.11 et 2.12. On voit aussi la détérioration flagrante de la sphéricité avec le limiteur SuperBee.

2.3.1.2 Impact de la méthode de splitting sur l'advection

Comme mentionné plus haut, nous utilisons un maillage 3D régulier et structuré pour nos simulations numériques. La discrétisation de notre boîte de calcul est donc tridimensionnelle et dirigée suivant les axes x , y et z . Cette discrétisation peut poser des problèmes lorsque l'advection du fluide se fait suivant une direction quelconque non colinéaire aux axes. En effet, la décomposition de l'advection dans la base (x, y, z) va privilégier le déplacement de fluide suivant ces trois directions. La méthode de splitting permet de minimiser ces problèmes. Comme nous pouvons le voir sur les figures 2.14, 2.15 et 2.16, dans le cas de la sphère qui se déplace diagonalement, sans méthode de splitting, certaines mailles sont mal alimentées en fluide et la sphère finit par perdre de sa sphéricité. La méthode splitting pallie cette difficulté, cependant elle introduit plus de diffusion numérique en aval de la sphère.

Dans le cas des instabilités de mélange de type Rayleigh-Taylor, la seule direction qui est privilégiée sur un temps long est la direction de la gravité z . Nous pouvons donc désactiver l'option de splitting dans ce cas-ci afin de gagner en temps de calcul.

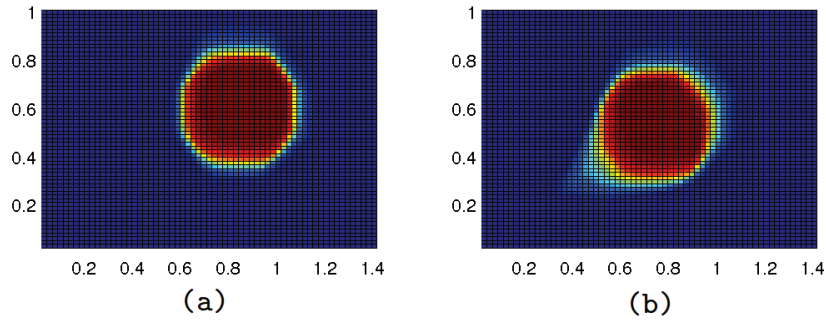


FIG. 2.14 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. La méthode de splitting assure une bonne sphéricité mais génère par contre une viscosité numérique anisotrope le long de la direction d'advection.

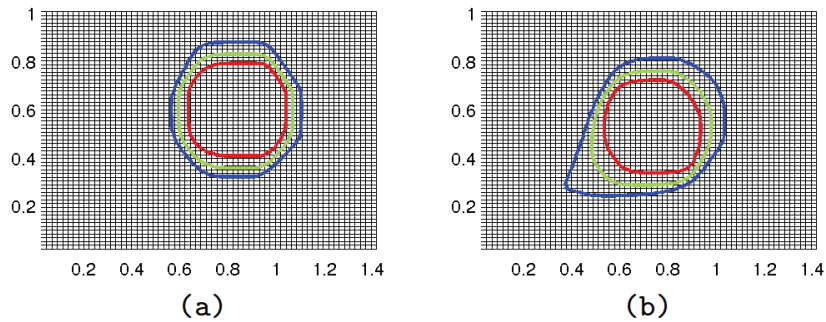


FIG. 2.15 – Contours de fraction volumique $c = 0,1, 0,5$ et $0,9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.14.

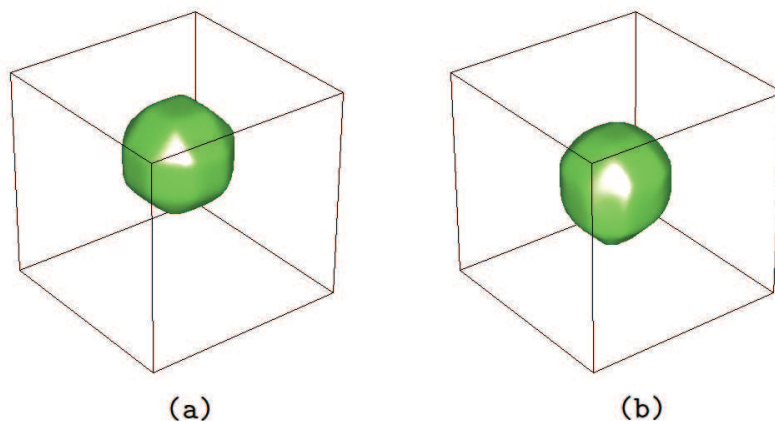


FIG. 2.16 – Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0,5$ obtenues après l’advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. On voit que bien que la méthode de splitting atténue le manque de sphéricité exposé en figures 2.14 et 2.15, elle ne l’annule pas complètement pour autant et transforme la sphère en ovale.

2.3.1.3 Impact du maillage sur l’advection avec limiteur SuperBee

Les figures 2.17, 2.18 et 2.19 exposent la sphère après deux traversées complètes de la boîte de simulation avec le schéma SuperBee pour différents maillages de la boîte (16^3 , 32^3 , 64^3 , 128^3). Lorsque le maillage est grossier, la diffusion numérique est trop forte et le limiteur ne peut contre-carrer le phénomène. Ainsi, après deux traversées, la sphère a quasiment disparu pour le premier maillage et est bien diffusée pour le second. A partir du troisième maillage, le nombre de noeuds est assez grand et le limiteur garde la discontinuité en densité sur environ 6 mailles. Nous voyons aussi qu’avec l’augmentation du nombre de noeuds, le limiteur tend à transformer la sphère en octogone.

Au vu de la gamme de maillage que nous utilisons pour nos simulations (au-dessus de $M = 128$), le limiteur semble garder la diffusion de l’interface sur un nombre de nœuds constant. La déformation de la géométrie se fait après un grand nombre de pas de temps, dans le cas d’instabilité de Rayleigh-Taylor turbulente les non-linéarités fortes présentes dans le fluide font que les bulles ne suivent pas assez longtemps une direction pour que le limiteur puisse déformer assez la géométrie de bulle au point de fausser les résultats.

2.3.1.4 Impact de la condition de CFL sur l’advection avec limiteur SuperBee

Les figures 2.20, 2.21 et 2.22 exposent la sphère après deux passages complets de la boîte de simulation avec le schéma SuperBee. Comme nous pouvons le voir, la condition de CFL a très peu d’impact sur la largeur de l’interface et donc sur la diffusion numérique. Le limiteur remplit son rôle sans problème, même à grande condition de CFL.

Le limiteur SuperBee est donc très efficace dans la gamme de condition de CFL étudiée. Au delà, le code commence à ne plus fonctionner de façon acceptable. Comme le montre la figure 2.23, nous voyons que notre condition CFL a bien pour limite la valeur 1,00. En effet, pour une condition CFL de 0,99, le schéma permet bien l’advection de la sphère, avec cependant des oscillations, alors que pour une condition de CFL de 1,00, le calcul diverge.

Nous avons donc montré que le schéma d’ordre 2 avec le limiteur SuperBee, que nous avons développé, diminue radicalement la diffusion numérique par rapport à l’ordre 1 du code, nous permettant ainsi une meilleure modélisation de la physique des mélanges à un nombre de maille égal.

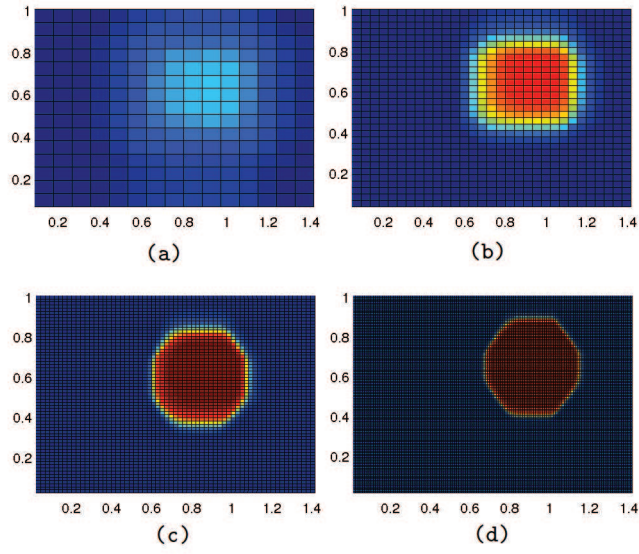


FIG. 2.17 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . À partir du maillage 64^3 , le limiteur SuperBee arrive à contrecarrer la viscosité numérique et garder l'interface sur un nombre constant de mailles.

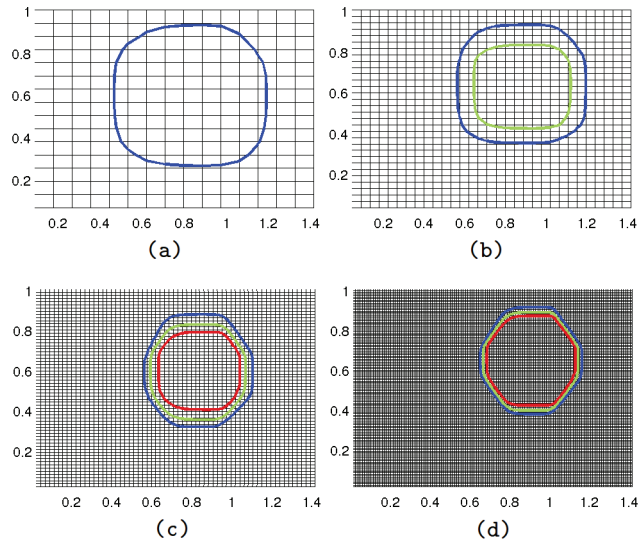


FIG. 2.18 – Contours de fraction volumique $c = 0, 1, 0,5$ et $0,9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.17.

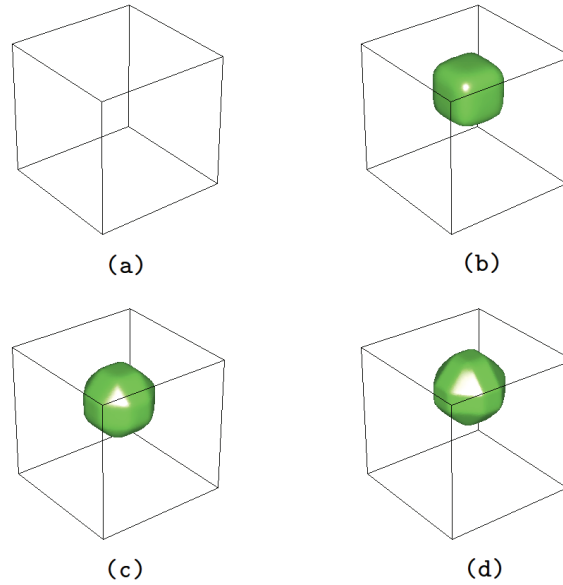


FIG. 2.19 – Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0,5$ après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . On confirme les remarques exposées en figures 2.17 et 2.18 et on peut aussi voir l'évolution de la sphère en dodécaèdre dû à l'action du limiteur.

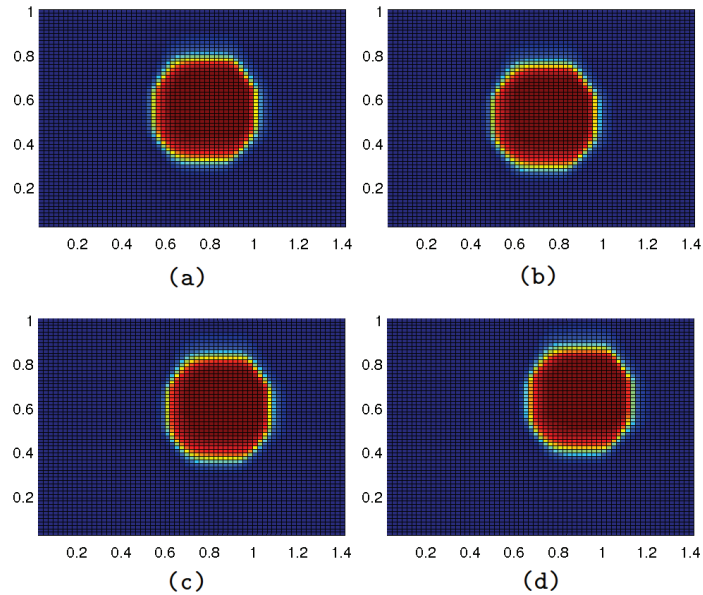


FIG. 2.20 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenus après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. Le limiteur est efficace pour toute la gamme de CFL.

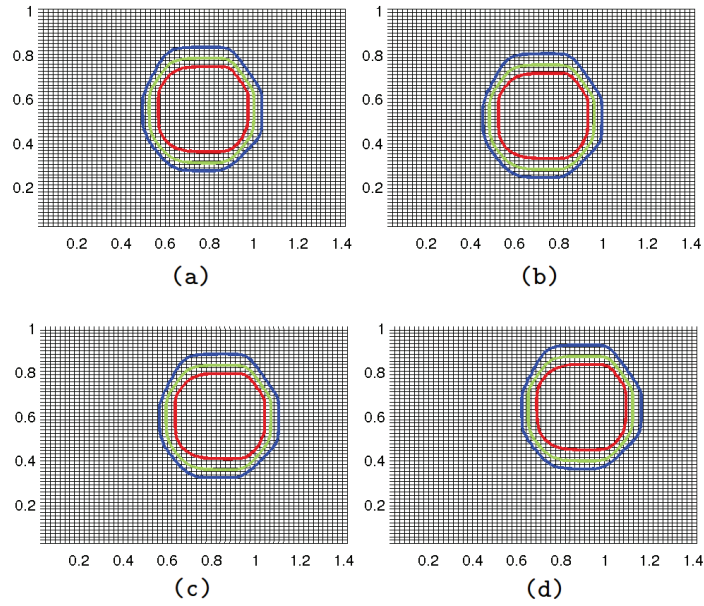


FIG. 2.21 – Contours de fraction volumique $c = 0,1, 0,5$ et $0,9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenus après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. Le limiteur est efficace pour toute la gamme de CFL comme vu en figure 2.20.

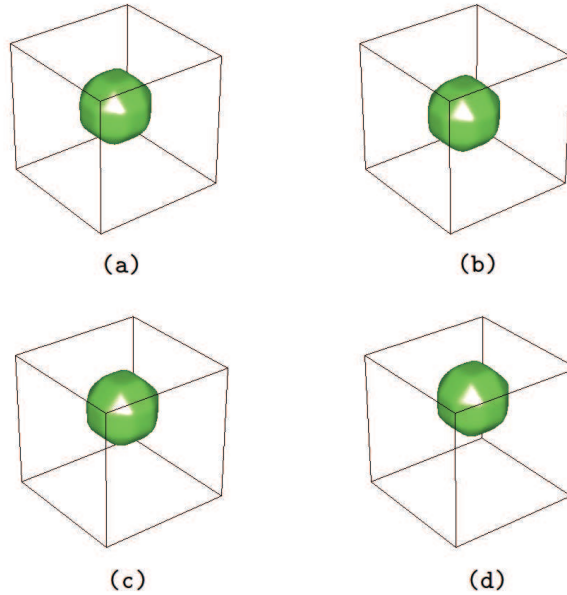


FIG. 2.22 – Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0,5$ obtenus après deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. On confirme les remarques exposées en figures 2.20 et 2.21.

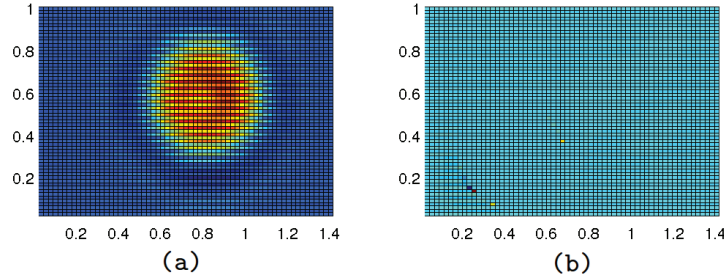


FIG. 2.23 – Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenus après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et avec deux conditions CFL : a) CFL=0,99 ; b) CFL=1,00. Pour une valeur de CFL de 0,99 le schéma converge malgré les oscillations présentes. Pour une valeur de CFL de 1,00, le schéma diverge et ne permet plus l'advection de la sphère.

2.3.1.5 Comportement du schéma pour une instabilité monomode

La figure 2.24 présente les résultats de simulations monomode pour une condition de CFL de 0.50 et une gamme de longueurs de maille de $h = 1/[32, 64, 128, 256]$ nœuds. L'ordre 2 en espace permet, bien sûr, d'obtenir un niveau de détail bien supérieur à celui obtenu avec l'ordre 1. Le limiteur semble cependant trop bien jouer son rôle, la bulle est plus aplatie pour l'ordre 2 mais surtout certaines interfaces entre fluides lourd et léger restent présentes à petites échelles alors que le mélange aurait dû les faire disparaître : cela se voit pour la simulation $h = 1/128$ mais surtout pour la simulation $h = 1/256$. Ce n'est en fait pas un problème et cela montre que notre schéma dans l'espace fonctionne efficacement en limitant au minimum la diffusion numérique. Il devient alors possible de choisir un nombre de Schmidt fini. Cela introduit de la diffusion aux interfaces grâce au phénomène physique de diffusion moléculaire qui force le mélange aux petites échelles.

La figure 2.25 montre l'évolution de la taille de la zone de mélange ainsi que sa vitesse pour ces simulations. Comme nous le voyons sur la figure 2.24, en changeant le maillage, nous changeons le nombre d'échelles physiques présentes dans le mélange, le comportement de la bulle se voit donc modifié et son évolution aussi, les courbes d'évolutions sont donc enchevêtrées. Il n'est pas possible de dire si la solution est convergée pour un maillage de $h = 1/256$, on retrouve l'ordre de convergence classique en regardant la variation de l'évolution. Comme l'évolution tend à s'accélérer en diminuant la longueur de maille, les résultats à l'ordre 2, étant au-dessus de ceux à l'ordre 1, sont donc meilleurs.

2.3.1.6 Conclusion sur la vérification du schéma d'ordre 2 en espace

Nous avons donc vérifié le bon comportement du schéma d'ordre 2 en espace. Le limiteur SuperBee choisi ici a radicalement diminué la diffusion numérique du code et ne semble pas être très sensible à la condition de CFL. Il a aussi amélioré le niveau des détails visibles par rapport aux résultats d'ordre 1 à longueur de maille égale. Bien sûr la longueur de maille n'est pas le paramètre que nous cherchons à maximiser. En effet, même si un maillage avec $h = 1/64$ donne à l'ordre 2 la même évolution de bulle qu'un maillage avec $h = 1/128$ à l'ordre 1, nous cherchons quand même à diminuer autant que possible la longueur de maille afin d'accéder aux plus petites échelles physiques possibles. Afin de ne pas allonger inutilement le calcul nous cherchons plutôt à maximiser le pas de temps et donc la condition de CFL.

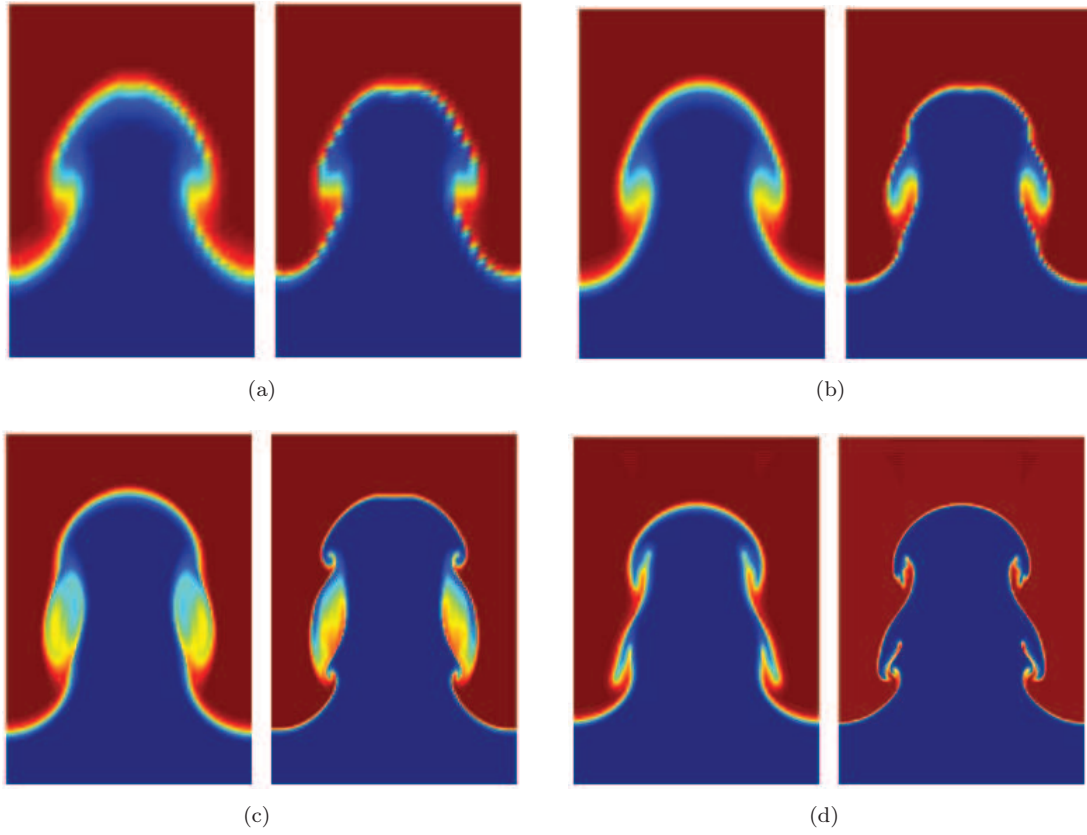


FIG. 2.24 – Carte en niveaux de couleurs de la densité, à l'ordre 1 à gauche et à l'ordre 2 avec limiteur SuperBee à droite, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D de (a) $32^2 \times 64$, (b) $64^2 \times 128$, (c) $128^2 \times 256$ et (d) $256^2 \times 512$ mailles. L'utilisation de limiteur permet d'obtenir un niveau de détail supérieur à celui de l'ordre 1. Le niveau de détail obtenu avec les limiteurs sur un maillage $128^2 \times 256$ est même supérieur au niveau de détail obtenu avec l'ordre 1 sur un maillage $256^2 \times 512$.

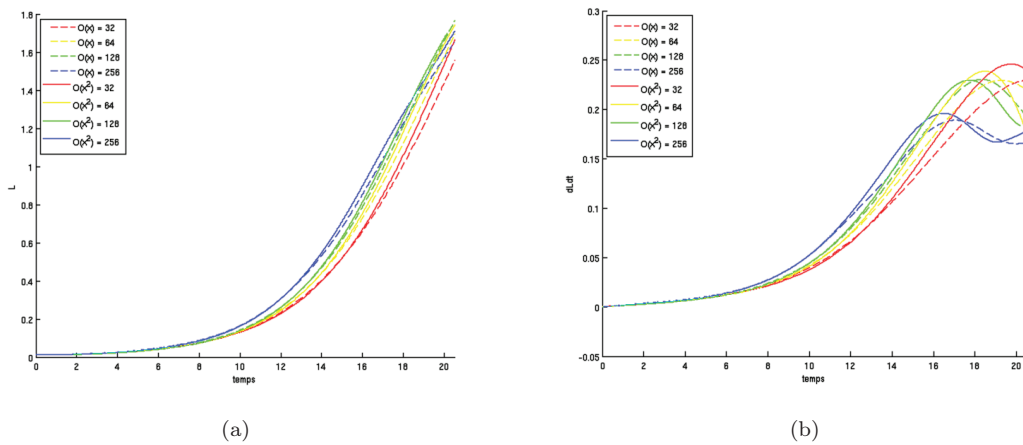


FIG. 2.25 – Évolutions de (a) la taille L de la zone de mélange, et de (b) sa dérivée temporelle, aux ordres 1 et 2 avec limiteur SuperBee pour quatre tailles de maille différentes $h = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256$.

2.3.2 Vérification du schéma d'ordre 2 en temps

Un schéma d'ordre 2 en temps est important si nous voulons bien capturer la dynamique du mélange. Pour vérifier le schéma, nous comparons les résultats de simulations monomodes, à différentes conditions de CFL, avec les mêmes simulations menées à l'ordre 1 en temps. Nous faisons notre étude de comparaison sur l'évolution de la taille de zone de mélange $L(t)$ de l'instabilité monomode. Pour vérifier sa convergence, nous considérons le résultat obtenu avec la plus faible condition de CFL comme la solution de référence $\phi_r(t)$. Nous prenons l'erreur relative ε comme :

$$\varepsilon = \frac{\phi - \phi_r}{\phi_r}, \quad (2.58)$$

avec :

$$\phi = \int_{T_{\text{simu}}} \frac{dL}{dt} dt = L(T_{\text{simu}}) - L(0), \quad (2.59)$$

où T_{simu} est la durée du mélange simulé.

La figure 2.26 expose les résultats obtenus pour une simulation monomode sur un maillage $32^2 \times 64$ sur une gamme de condition de CFL de $[0,75; 0,50; 0,25; 0,10; 0,05; 0,01; 0,005]$. Comme nous pouvons le voir, les évolutions à l'ordre 2 sont bien mieux convergées qu'à l'ordre 1 même à forte condition CFL. Pour les deux schémas, en diminuant la condition de CFL on tend à accélérer l'évolution de L . L'évolution trouvée à l'ordre 1 pour une condition de CFL de 0.005 est cependant moins rapide que celle trouvée à l'ordre 2 pour une condition de CFL de 0.75. Comme le montre la figure 2.26(b), la convergence à l'ordre 2 est plus rapide, nous avons une pente d'environ 1.5 au lieu de 1 et l'écart entre les résultats de simulation à CFL=0.75 et CFL=0.01 est plus faible à l'ordre 2 qu'à l'ordre 1 d'un facteur 20 ($5 \cdot 10^{-3}$ au lieu de 10^{-1}). Cet écart tend même à diminuer lorsque l'on augmente le nombre de mailles comme le montre la figure 2.27. Alors que cet écart reste d'environ 10^{-1} pour l'ordre 1, il descend à 10^{-3} pour l'ordre 2, nous passons alors à un facteur 100.

2.3.2.1 Conclusion sur la vérification du schéma d'ordre 2 en temps

Nous avons vérifié le bon comportement et la bonne convergence du schéma d'ordre 2 en temps suivant la condition de CFL. L'ordre 2 donne des résultats bien meilleurs et même non accessibles par l'ordre 1 à nombre de mailles égal. Il nous permet aussi d'obtenir une très bonne convergence des résultats pour une condition de CFL de 0,75, ce qui nous permettra de minimiser le temps de calcul.

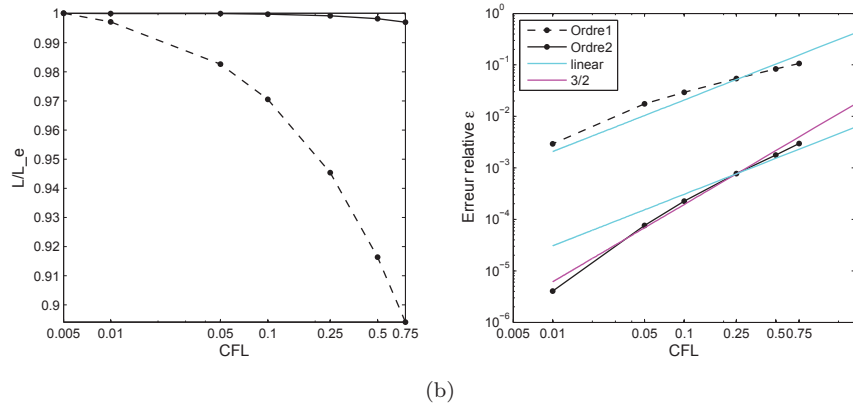
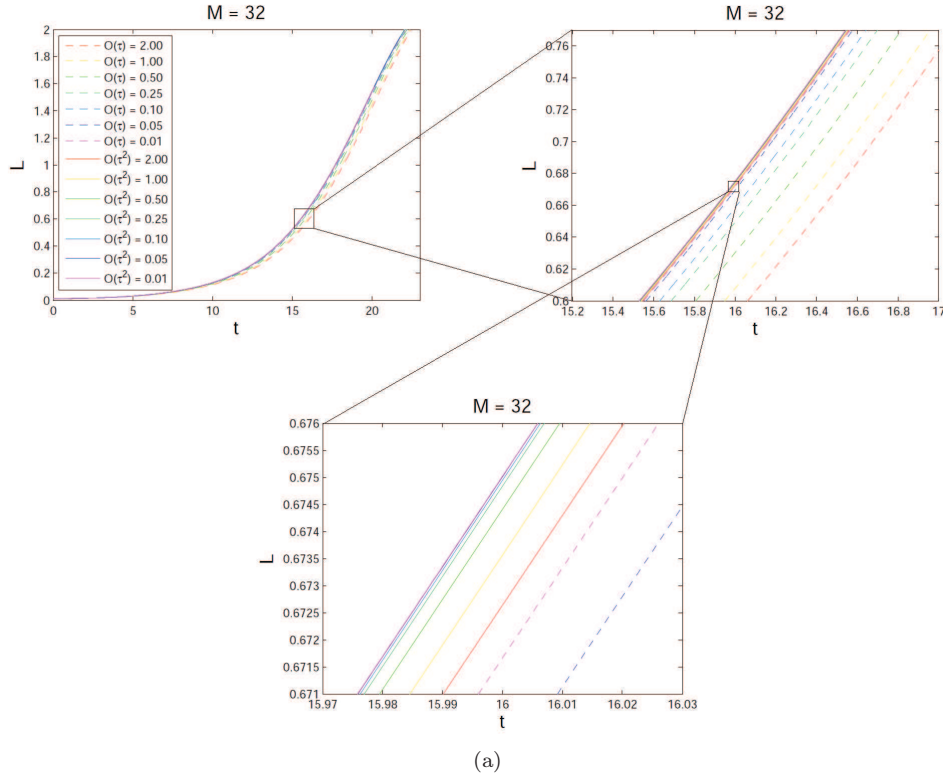


FIG. 2.26 – Évolution et erreur relative de L pour une simulation monomode $32^2 \times 64$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la taille de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Ainsi, le code converge à l'ordre 1,5.

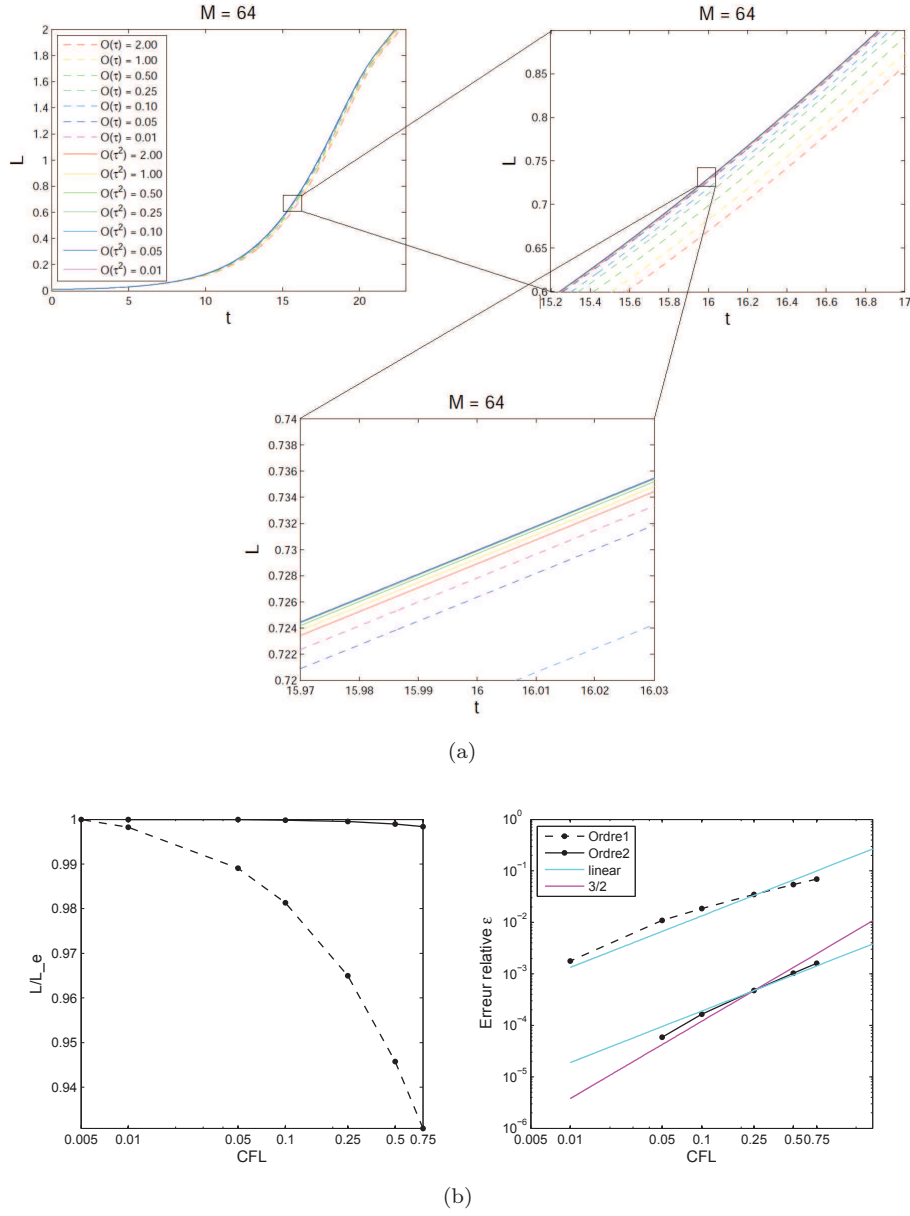


FIG. 2.27 – Évolution et erreur relative de L pour une simulation monomode $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Comme vu en figure 2.26, le code semble converger à l'ordre 1,5.

2.3.3 Vérification du code sur simulations d'instabilités turbulentes

Le but final du développement d'un tel code est de simuler des instabilités de mélange turbulent. Dès lors, il est important de vérifier la bonne convergence de nos résultats dans ce cas précis.

2.3.3.1 Convergence par rapport à la longueur de maille

L'étude de la convergence du code par rapport à la longueur de maille est difficile dans le cadre des instabilités turbulentes. En effet, lorsque nous changeons la longueur de maille, nous changeons les paramètres physiques du mélange (échelle de dissipation, viscosité, etc), la turbulence de l'écoulement simulé est alors changée et, contrairement au cas monomode, l'évolution du mélange est modifiée de façon trop significative pour pouvoir faire une comparaison. Comme mentionné auparavant, nous ne cherchons cependant pas à trouver le maillage optimum car nous voulons avoir accès aux plus petites échelles physiques possibles. Nous optimisons alors la condition de CFL pour minimiser le temps de calcul.

2.3.3.2 Convergence par rapport à la condition de CFL

Nous étudions la convergence du calcul sur un maillage donné en faisant varier la condition de CFL. Par définition, le mélange de deux fluides tend à faire disparaître les contrastes en densité et les discontinuités sont donc plus « molles ». Le limiteur ne devient alors instable que pour une condition de CFL de 2.50. Nous faisons donc nos calculs pour une condition de CFL comprise dans la gamme $[2, 00; 1, 00; 0, 50; 0, 25; 0, 10]$. Pour s'assurer de la convergence du code nous étudions les statistiques qui sont importantes pour l'étude des instabilités de mélange, à savoir la longueur de mélange L , l'énergie potentielle K_p , l'énergie cinétique turbulente K_t et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente E . Tout autre statistique utiles du bilan d'énergie monofluide 0D dérive de ces grandeurs. Nous expliciterons ces différents termes lors de la phase de validation au prochain chapitre.

Les figures 2.28, 2.29, 2.30 et 2.31 montrent les évolutions ainsi que l'erreur relative pour les statistiques L , K_p , K_t et E trouvés avec des simulations à l'ordre 1 et 2. Ainsi les résultats obtenus à l'ordre 2 convergent plus rapidement (pente de 1,5) et mieux qu'avec l'ordre 1.

Bien sûr, pour un maillage aussi grossier, la différence entre l'ordre 1 et 2 est grande car la diffusion numérique est importante à l'ordre 1. Cependant, les résultats montrent que les méthodes numériques à l'ordre 2 jouent bien leur rôle et améliorent donc les résultats.

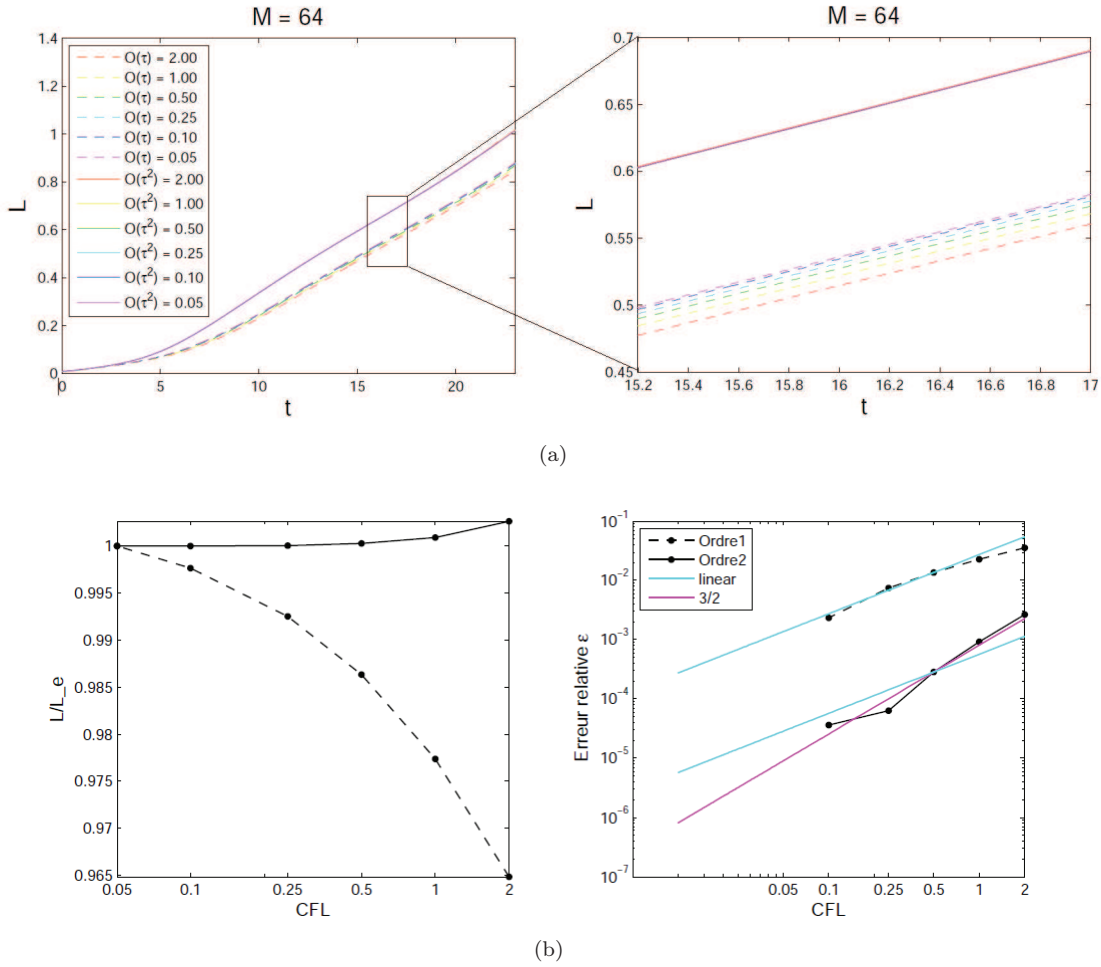


FIG. 2.28 – Évolution et erreur relative de L pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5, on peut toutefois remarquer une faible amélioration en passant de CFL=0,25 à CFL=0,1.

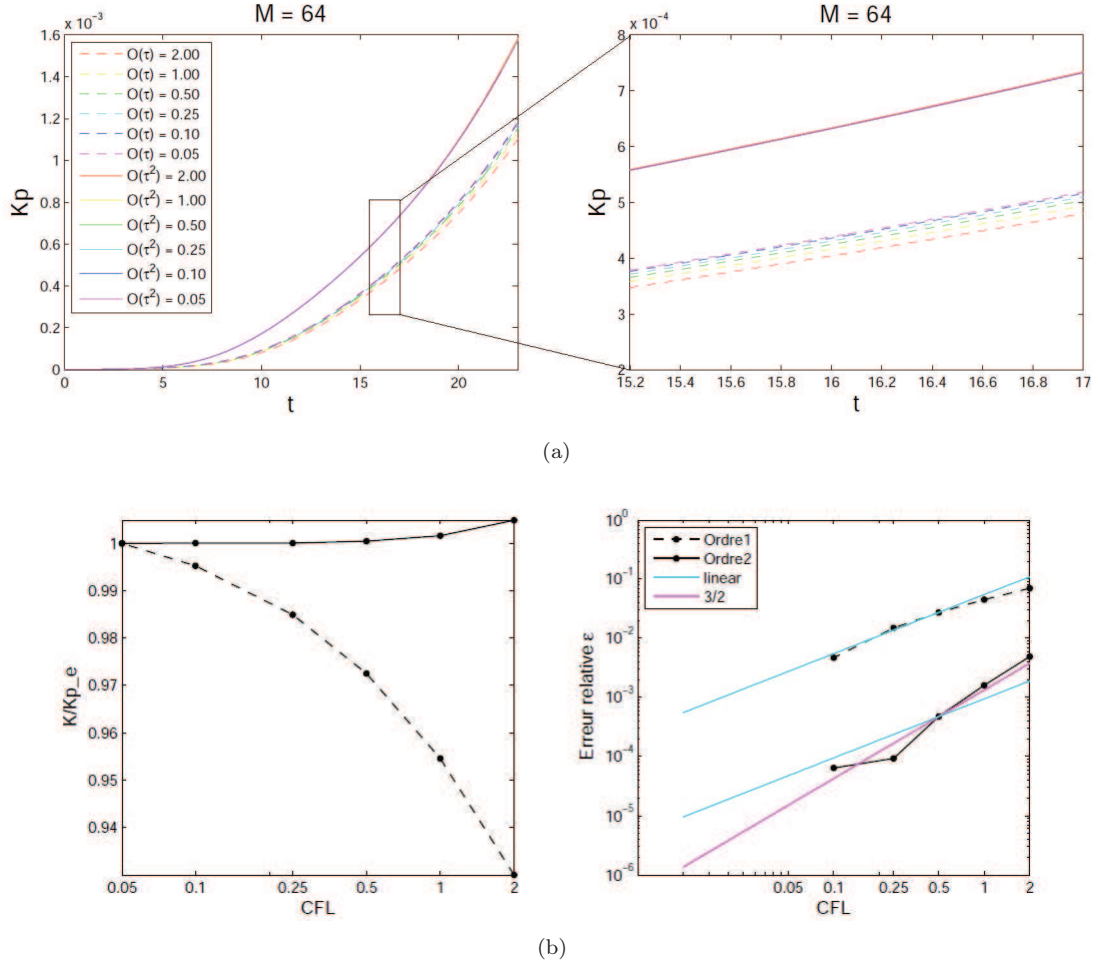
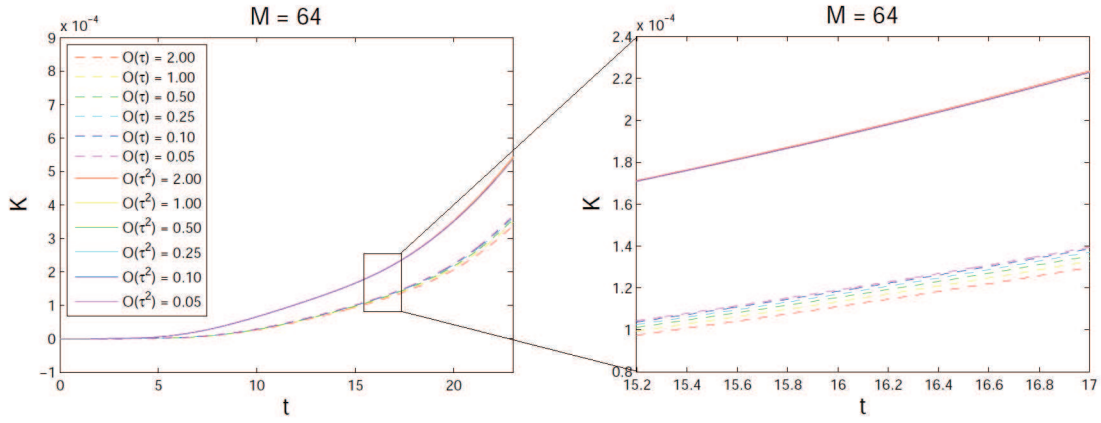
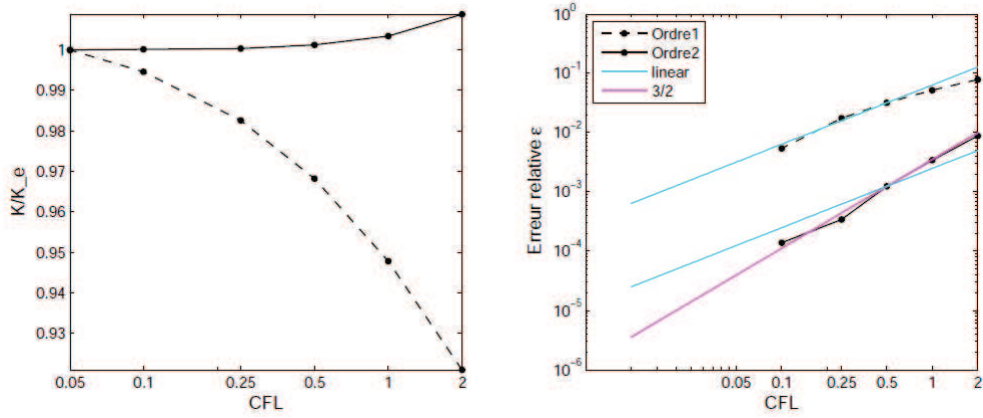


FIG. 2.29 – Évolution et erreur relative de K_p pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5, on peut toutefois remarquer une faible amélioration en passant de CFL=0,25 à CFL=0,1.

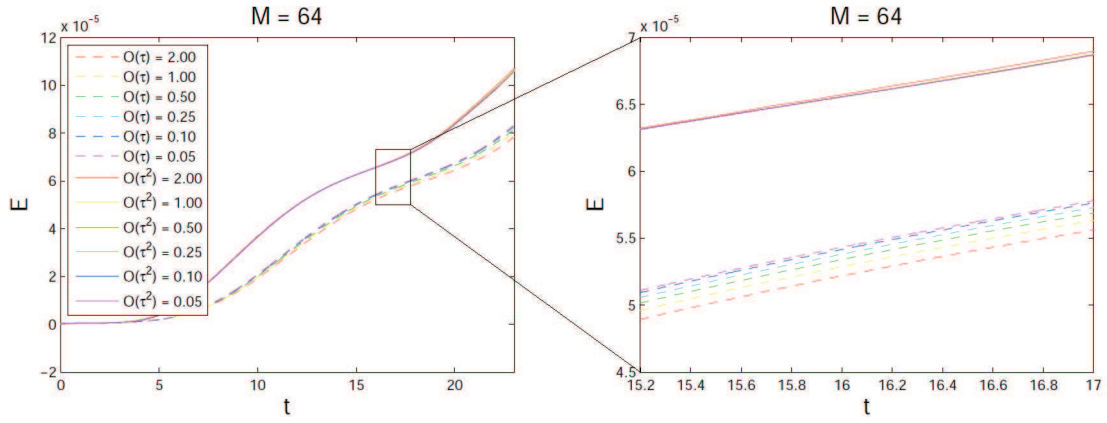


(a)

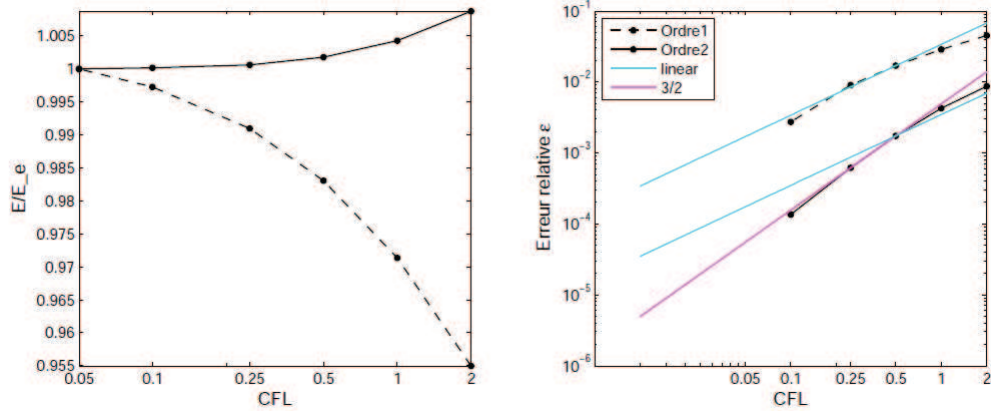


(b)

FIG. 2.30 – Évolution et erreur relative de K_t pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5.



(a)



(b)

FIG. 2.31 – Évolution et erreur relative de E pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5.

Validation du code TURMIX3D

Deux sources d’erreurs sont responsables de l’écart possible entre les résultats de nos simulations numériques et ceux de simulations numériques dont les résultats sont déjà validés et publiés : les méthodes numériques et la modélisation mathématique du phénomène physique. La phase de vérification permet de contrôler les méthodes numériques et a été présentée dans le chapitre précédent. Le code numérique vérifie bien les équations codées et converge vers une solution. La phase de validation permet de contrôler la modélisation mathématique. Nous nous intéressons ici à la phase de validation.

Notre méthode de validation consiste à reproduire des résultats classiques et déjà publiés dans le cadre des instabilités de Rayleigh-Taylor (IRT) :

- les études du coefficient de croissance α et de la vitesse terminale $h_b'^{\text{term}}$ d’une bulle monomode publiées par Ramaprabhu & Dimonte [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006],
- l’étude de la réponse linéaire d’une IRT publiée par l’alpha-group [Dimonte 2004],
- l’étude du bilan énergétique et des spectres d’énergie du mélange turbulent d’une IRT publiée par Cabot & Cook [Cabot 2006],
- l’étude des transferts énergétiques dans un mélange turbulent d’une IRT publiée par Cook & Zhou [Cook 2002].

3.1 Les études monomode de Ramaprabhu et Dimonte

Dans une instabilité de Rayleigh-Taylor, lorsque la perturbation de l’interface est une fonction sinusoïdale de période spatiale λ proportionnelle à la largeur de la boîte $\lambda \propto H$, la zone de mélange évolue alors sous forme de bulles/champignons. Nous étudions ici le cas où $\lambda = H$, l’instabilité crée alors une seule bulle. Celle-ci présente différentes caractéristiques bien connues comme :

1. une interface variable selon le nombre d’Atwood,
2. une phase d’évolution quadratique de l’amplitude de la bulle $h_b(t) = \alpha_b A g (t - t_0)^2$, où α_b est le coefficient de croissance de la bulle et t_0 le temps initial à partir duquel l’évolution du mélange est auto-semblable,
3. une phase à vitesse terminale déterminée par $h_b'^{\text{term}} = \text{Fr} \sqrt{A g \lambda / (1 + A)}$, où $\text{Fr} = 0,56$ quel que soit le nombre d’Atwood, cette valeur est donnée par le calcul de l’écoulement potentiel autour de la bulle.

Ramaprabhu et Dimonte présentent les valeurs de ces caractéristiques trouvées pour plusieurs simulations de $64^2 \times 512$ nœuds avec différents nombres d’Atwood. L’amplitude initiale de l’interface perturbée est :

$$h(x, y) = h_0 \left(\cos\left(\frac{2\pi x}{H}\right) + \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) \right) \quad (3.1)$$

avec $h_0 \ll H$.

1. La figure 3.1 montre les surfaces d’isovaleurs 0, 5 des fractions volumiques pour des simulations à $A = 0, 1; 0, 5$ et $0, 9$. La répartition des fluides lourd et léger dans la boîte dépend du contraste de densité et donc du nombre d’Atwood. Plus le contraste est grand, plus cette répartition est asymétrique avec une large bulle de fluide léger qui monte et des pointes de fluide lourd qui descendent. Comme le

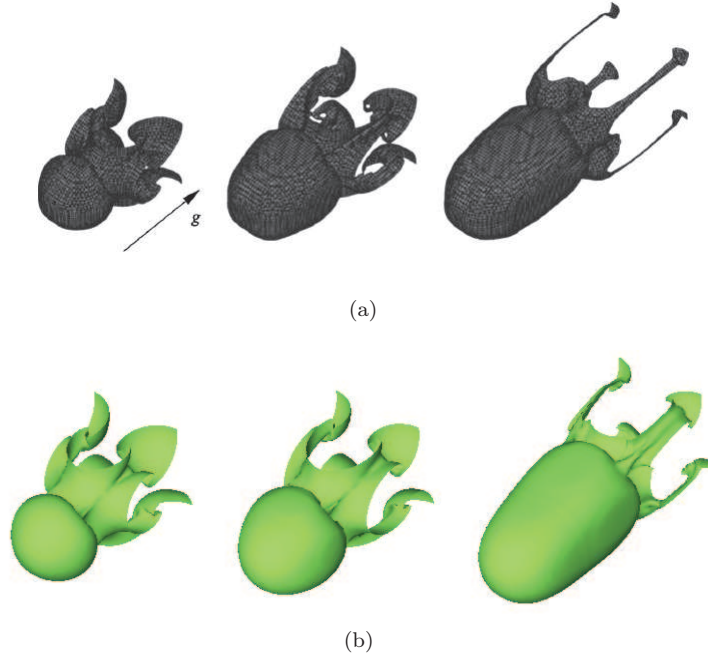


FIG. 3.1 – Isosurfaces de fraction volumique $c = 0.5$ d’une simulation monomode pour trois nombres d’Atwood différents $A=0,1, 0,5$ et $0,9$, (a) publiées [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006], et (b) obtenues avec nos résultats. On calcule l’isosurface lorsque la taille de bulle h_b est égale à $h_b = 0,8\lambda$, où λ est le diamètre de la bulle. Pour les trois nombres d’Atwood, l’aspect de nos résultats est quasiment identique à ceux déjà publiés.

montre la figure 3.1, nous obtenons un aspect identique aux surfaces publiées, celle que nous obtenons pour $A = 0,9$ étant cependant plus perturbée que celle de Ramaprabhu. Ceci est dû au fait que le code utilisé par Ramaprabhu résout l’équation d’Euler. La viscosité n’étant pas prise en compte, le cisaillement infini empêche les instabilités de type Kelvin-Helmholtz de se produire le long des pointes.

2. La figure 3.2 présente les profils d’évolution de la bulle $h_b(t)$ ainsi que la vitesse $h'_b(t)$ avec la vitesse terminale $h'_b{}^{\text{term}}$ trouvés par Ramaprabhu pour un nombre d’Atwood de $A = 0.5$. Nous présentons nos résultats pour les trois nombres d’Atwood $A = 0.1, 0.5$ et 0.9 étudiés. Nos résultats à $A = 0.5$ concordent parfaitement avec ceux de Ramaprabhu, que ce soit pour l’évolution de la bulle ou pour sa vitesse terminale. Bien qu’il doive théoriquement être constant, le coefficient de croissance augmente lorsque le nombre d’Atwood diminue. Bien que non constant suivant le nombre d’Atwood, les trois valeurs obtenues d’ α , $\alpha_{01} = 0,070$, $\alpha_{05} = 0,054$ et $\alpha_{09} = 0,048$, sont cependant dans l’intervalle de valeurs donné par Ramaprabhu $\alpha \sim 0,03 - 0,09$.

3. Les vitesses terminales obtenues numériquement nous permettent de calculer le nombre de Froude associé. Pour un nombre d’Atwood $A = 0,5$, nous avons une vitesse terminale de $h'_b{}^{\text{term}} = 1,4$ cm/s qui correspond parfaitement avec la valeur trouvée par Ramaprabhu, pour un nombre de Froude de $Fr = 0,54$ proche de la valeur théorique de $Fr = 0,56$. Pour $A = 0,1$ et $A = 0,9$, nous avons respectivement $Fr = 0,56$ et $Fr = 0,52$. Ainsi nos résultats donnent aussi une quasi indépendance du nombre de Froude par rapport au nombre d’Atwood.

Contrairement aux résultats de Ramaprabhu, nous obtenons plusieurs oscillations dans l’évolution de la vitesse $h'_b(t)$. Chaque oscillation correspond à la formation de tourbillons (instabilité de Kelvin-

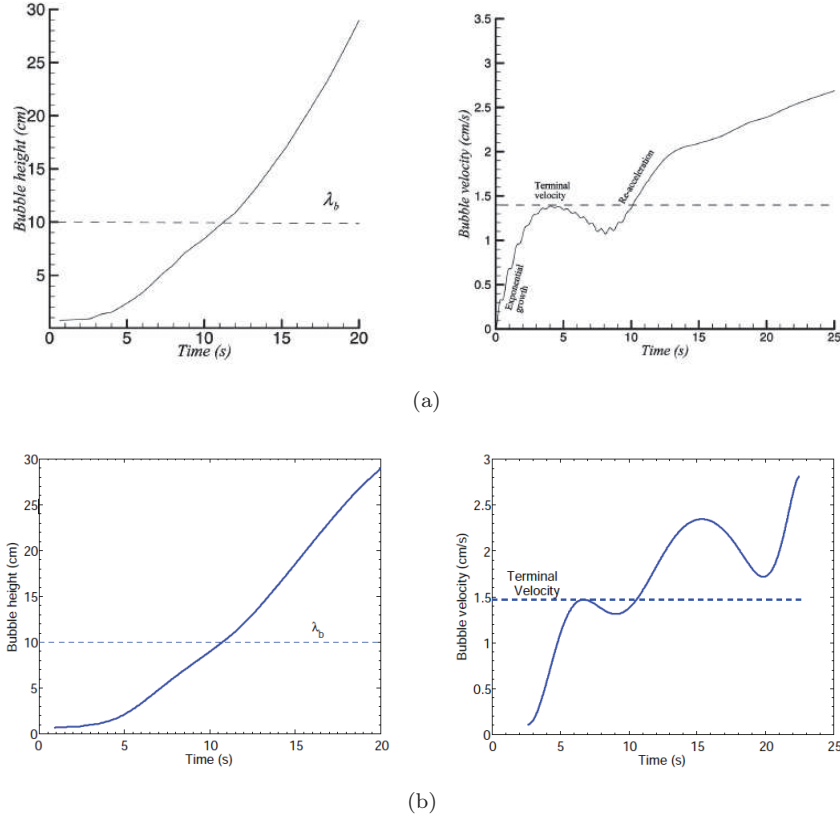


FIG. 3.2 – Évolutions de la taille de bulle h_b , et de sa vitesse h'_b , d'une simulation monomode avec un nombre d'Awood de $A = 0,5$, (a) publiées [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006], et obtenues avec (b) nos résultats. Nous obtenons la même vitesse terminale. La deuxième variation de vitesse dans notre cas est dû à une seconde instabilité de Kelvin-Helmholtz qui se développe.

Helmholtz, KH) qui prennent de l'énergie au mélange et diminuent ainsi l'accélération de la bulle. La première formation de tourbillons provient de la perturbation initiale du champ de densité. Les suivantes proviennent d'instabilités de KH induites par les cisaillements latéraux. Chaque fois que la bulle évoluera assez pour créer des conditions propices aux instabilités de KH, de nouveaux tourbillons se créeront et une nouvelle oscillation dans le champ de vitesse se produira. Le code de Ramaprabhu étant sans viscosité physique, il ne produit pas ces instabilités dues aux forces visqueuses.

3.2 Réponse linéaire de l'alpha-group

Le régime linéaire apparaît aux instants précoces de l'instabilité. L'amplitude des vitesses étant encore très faible, les termes non-linéaires sont négligeables. De cette approximation, il a été établi [Rayleigh 1883, Chandrasekhar 1961] a établi que l'évolution initiale de l'amplitude de chaque mode de vecteur d'onde k se fait exponentiellement [$a(k, t) = \exp(\pm \Gamma(k)t)$] avec, dans le cas d'une tension de surface et d'une viscosité nulles, un taux de croissance analytique $\Gamma_{\text{Euler}}(k)$ de la forme :

$$\Gamma_{\text{Euler}}(k) = \sqrt{Agk} \quad (3.2)$$

L'étude de la réponse linéaire par l'alpha-group a été faite en réalisant plusieurs instabilités avec comme perturbations initiales des surfaces cosinusoidales de différentes périodicités. Il est en fait pos-

sible de faire l'étude linéaire à partir d'une seule simulation dont la surface initiale est une superposition de tous les modes accessibles par le maillage. On obtient ensuite, en faisant l'étude dans l'espace réciproque, l'évolution de chaque mode en fonction du vecteur d'onde $\Gamma(k_x, k_y)$, avec $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$.

En prenant pour le calcul une viscosité physique ν_{phy} nulle, nous obtenons donc $\Gamma_{\text{Euler}}^{\text{num}}(k_x, k_y)$. La comparaison de notre résultat avec la valeur analytique de référence nous permettra ainsi de déterminer qualitativement l'impact de la viscosité numérique de notre code.

Pour étudier la réponse linéaire, il est important que les amplitudes initiales des modes soient négligeables par rapport à leur longueur d'onde associée $a(k = 2\pi/\lambda, t = 0) \ll \lambda$. Ainsi, un bruit rose, qui donne une décroissance de $a(k, t = 0)$ en $1/k$ s'avère être plus approprié que le bruit blanc, car il permet d'avoir un rapport $a(k, t = 0)/\lambda$ constant. L'évolution de chaque mode se fait ainsi dans les mêmes proportions par rapport à la longueur d'onde considérée.

Il suffit ensuite de faire évoluer le code sur un petit intervalle de temps à partir de cet écoulement initial et de comparer le taux de croissance trouvé par simulation au taux de croissance analytique.

Afin de comparer nos résultats à ceux publiés par l' α -group, nous avons mené l'étude sur un maillage de $256^2 \times 512$ nœuds sur les 200 premiers pas de temps. La figure 3.3 représente les surfaces des taux de croissances numérique $\Gamma_{\text{Euler}}^{\text{num}}(k_x, k_y)$ et analytique $\sqrt{Ag\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}$ respectivement en transparent et plein.

La différence entre les deux surfaces met en avant la viscosité numérique du code.

Comme nous pouvions le supposer, le code génère une viscosité numérique qui tend à ralentir la formation des structures de petites longueurs d'onde.

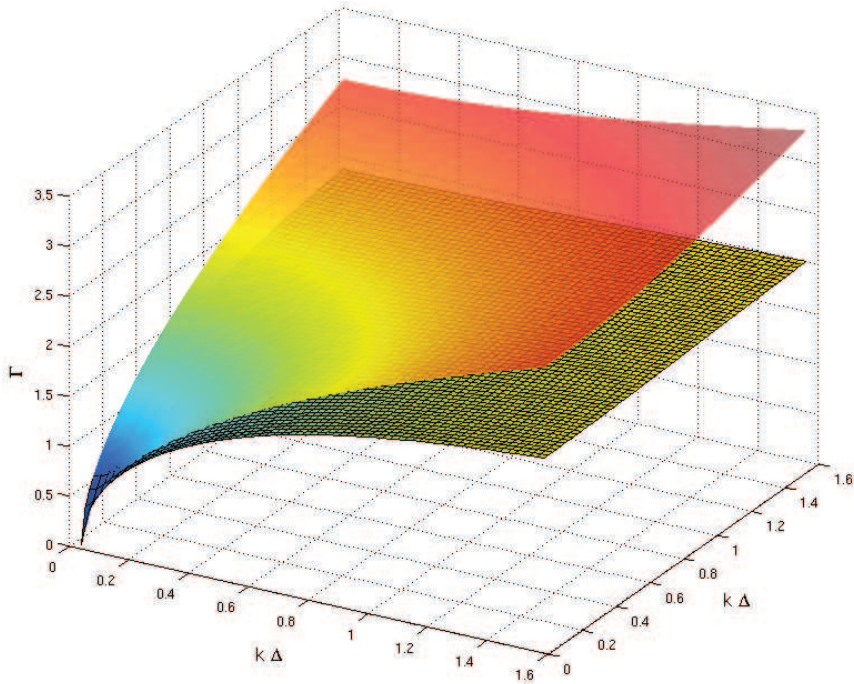


FIG. 3.3 – Représentation du taux de croissance Γ dans le champ de vecteur d'onde (k_x, k_y) . En plein maillé : $\Gamma_{\text{Euler}}^{\text{num}}(k_x, k_y)$ - En transparent : $\Gamma_{\text{Euler}} = \sqrt{Ag\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}$. Δ est la longueur de maille. Nos résultats dénotent une évolution plus lente des différents modes présents dans la perturbation initiale, ce qui implique la présence d'une viscosité numérique.

Chandrasekhar [Chandrasekhar 1961] a aussi déterminé, dans le cas d'une viscosité non-nulle, que l'évolution initiale de l'amplitude de chaque mode est régie par un taux de croissance obtenu comme solution de :

$$\Gamma^2 - Akg \sim -4\nu A^2 k^2 \Gamma + 4\nu^2 A^2 k^2 \left(\sqrt{1 + \frac{\Gamma}{(k^2 \nu)}} - 1 \right) \quad (3.3)$$

En faisant l'hypothèse que la viscosité numérique de notre code se comporte comme une viscosité physique, il est alors possible de quantifier cette première en déterminant la valeur de ν qui nous permet de retrouver analytiquement la surface produite par notre code.

L'alpha-group suppose une viscosité numérique de la forme $\nu = \omega \sqrt{Ag\Delta^3}$ où Δ est la longueur de maille. La figure 3.4 montre le résultat en prenant $\omega = 0.2$.

Le paramètre généralement étudié est le rapport $\Gamma/\Gamma_{\text{Euler}}$. En projetant sur la dimension $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, on peut ainsi comparer nos résultats à ceux publiés par l'alpha-group [Dimonte 2004] (voir figure 3.5).

La comparaison est positive. Notre code se comporte assez bien par rapport à ceux utilisés par l' α -group et donne un profil équivalent à celui trouvé par le code RTI-3D [Andrews 1995] qui apparaît être le plus proche du nôtre au niveau de la modélisation et des méthodes numériques.

Il est important de noter cependant qu'une viscosité numérique se comportant comme une viscosité physique est une hypothèse forte qui nécessite une étude approfondie afin de savoir quelles en sont les limites, en particulier en régime non-linéaire ou turbulent. Pour cela nous avons fait une étude 0D du bilan d'énergie en régime turbulent qui nous permet d'obtenir la viscosité totale du code. L'étude 0D de l'énergie dissipée et du bilan d'énergie au cours du temps nous permet aussi de déterminer cette viscosité. Le grand avantage de cette méthode est qu'elle nous permet d'obtenir ν_{code} tout au long de la simulation.

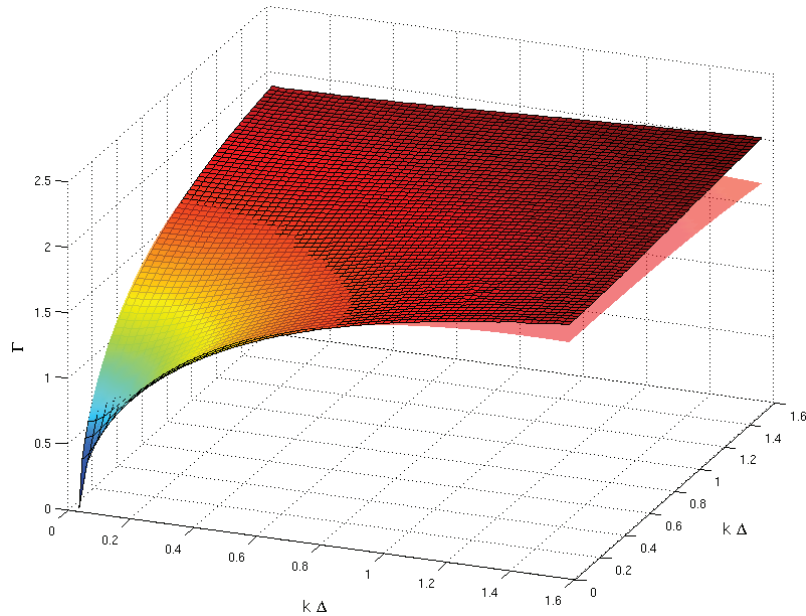


FIG. 3.4 – Représentation du taux de croissance dans le champ de vecteurs d'onde (k_x, k_y) . En plein : $\Gamma_{\text{num}}(k_x, k_y)$ - En transparent : $\Gamma(\omega = 0.2)$. Δ est la longueur de maille. Les surfaces sont presque identiques, nous pouvons ainsi quantifier la viscosité totale du code lors de la phase linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

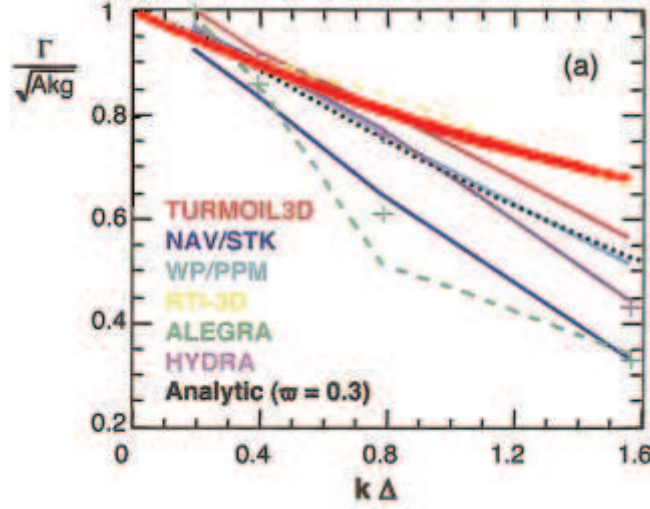


FIG. 3.5 – Comparaison des Γ suivant $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ trouvés par notre code (rouge vif) et par l' α -group (reproduit de [Dimonte 2004]). Notre code se comporte de la même façon que le code RTI-3D (jaune), code qui se trouve être le plus proche du nôtre en matière de modélisation et de méthodes numériques.

La dissipation d'énergie totale E peut être déterminée par deux approches :

- en calculant le bilan du cisaillement local du fluide dans la zone de mélange (ZDM), modélisé par les gradients du champ de vitesse u_i (avec $dV = dx dy dz$) :

$$E = 2\nu \frac{\int_{\text{ZDM}} \rho (\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2 dV}{\int_{\text{ZDM}} \rho dV} \quad (3.4)$$

- en calculant la variation de la différence entre l'énergie potentielle K_P du système et l'énergie cinétique K produite dans la zone de mélange de longueur L :

$$E = \frac{1}{L} \frac{d}{dt} (LK_P - LK) \quad (3.5)$$

Avec :

$$L = 6 \int_V \bar{\alpha}(1 - \bar{\alpha}) dz \quad \text{où} \quad \bar{\alpha}(z) = \int_S \alpha(x, y, z) dx dy \quad (3.6)$$

$$K_P = \frac{\int_{\text{ZDM}} \rho g z dV}{\int_{\text{ZDM}} \rho dV} \quad (3.7)$$

$$K = \frac{\int_{\text{ZDM}} \rho \mathbf{u}^2 / 2 dV}{\int_{\text{ZDM}} \rho dV} \quad (3.8)$$

où α est la fraction volumique de fluide lourd, g la gravité dirigée suivant z , ρ la densité du mélange et $\mathbf{u}$ le champ de vitesse local. Ainsi le rapport entre les deux équations donne la viscosité réelle du code :

$$\nu(t) = \nu(t)_{\text{code}} = \frac{\frac{1}{L} d_t (LK_i - LK)}{2(\partial_i u_j + \partial_j u_i)^2} \quad (3.9)$$

Pour cette étude, nous faisons une simulation avec $\nu_{\text{phy}} = 0$, la viscosité du code calculée représente alors la viscosité numérique $\nu_{\text{code}} = \nu_{\text{num}}$. Le résultat est présenté sur la figure 3.6. Nous pouvons

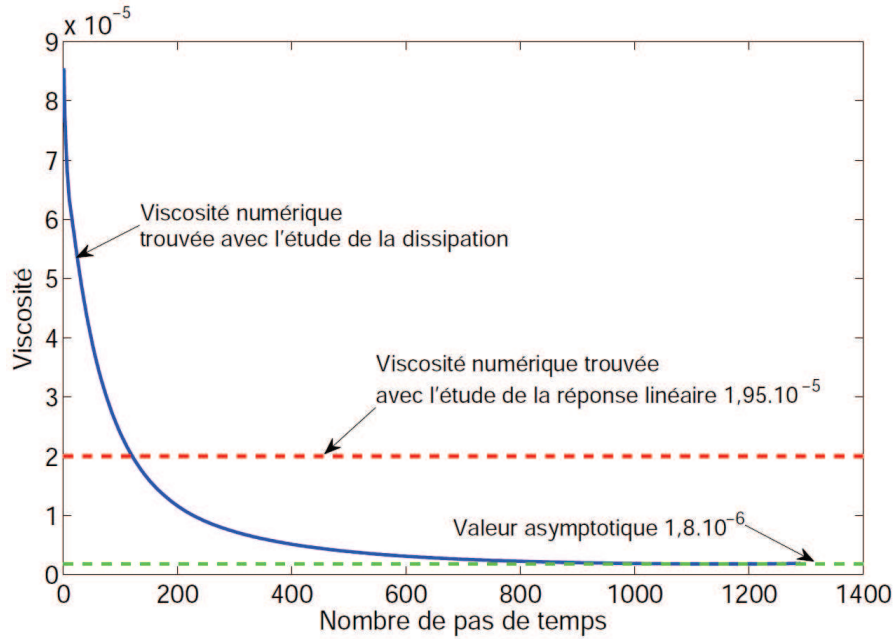


FIG. 3.6 – Évolution de la viscosité du code numérique. La viscosité totale du code converge vers une valeur proche de celle de viscosité physique donnée.

remarquer qu'il y a un facteur 10 entre la valeur trouvée avec la réponse linéaire ($\nu = 2.10^{-5}$) et la valeur asymptotique du code trouvée par la dissipation totale ($\nu = 2.10^{-6}$). La viscosité numérique du code est donc plus faible que prévu par la réponse linéaire.

Ce résultat signifie que nous ne sommes pas limités par une viscosité numérique trop forte. Ainsi pour une viscosité physique de $\nu_{phy} = 2.10^{-5}$, la viscosité réelle du code est de $\nu_{code} = \nu_{phy} + \nu_{num} = 2.10^{-5} + 2.10^{-6} = 2,2.10^{-5}$ au lieu de $\nu_{code} = 4.10^{-5}$. Le nombre de Reynolds atteint lors de nos simulations se trouve donc être plus grand d'un facteur 2, nous permettant ainsi d'obtenir des instabilités plus rapidement en régime turbulent développé avec des spectres d'énergie plus étendus au niveau de la cascade inertielle et cela pour un même nombre de mailles.

Ainsi, l'étude de la réponse linéaire détermine une viscosité numérique bien plus forte que celle réellement présente dans les simulations. Pour une simulation de 256^3 nœuds, notre viscosité numérique s'avère être plus faible que la viscosité physique par un ordre de grandeur, pour une simulation 512^3 , elle est de deux ordres de grandeur plus faible.

3.3 Bilan et spectre d'énergie de Cabot et Cook

Nous voulons ici valider les grandeurs 0D caractéristiques de l'évolution du mélange et du bilan d'énergie calculées par notre code. En 2006, Cabot et Cook ont simulé sur super-calculateur une instabilité de Rayleigh-Taylor dans une boîte de calcul de 3072^3 nœuds [Cabot 2006]. Ce record de raffinement permit d'étudier le mélange turbulent avec une échelle de dissipation bien plus petite que les simulations précédentes. Leurs résultats pour l'étude du bilan et des spectres d'énergie représentent donc une référence incontournable sur laquelle s'appuyer pour valider le bon comportement de notre code. Notre simulation a été faite dans une boîte de 512^3 nœuds.

La figure 3.10 expose les résultats publiés et nos résultats sur le coefficient de croissance de la zone de mélange et le nombre de Reynolds. Comme nous l'avons vu en introduction, la taille de la

zone de mélange évolue suivant :

$$L = \alpha A g t^2 \quad (3.10)$$

où α est une constante appelée le coefficient de croissance. Plusieurs formules permettent de déterminer ce coefficient :

1. En utilisant la formule brute : $\alpha = L/(A g t^2)$.
2. En utilisant un temps t_0 qui corrige l'origine des temps pour reproduire plus précisément le mélange auto-semblable : $\alpha = L/(A g (t - t_0)^2)$.
3. En utilisant les termes de variations afin de faire disparaître l'origine des temps : $\alpha = L'^2/(4 A g L)$.

Cabot et Cook utilisent les formules 1 et 3 (attention ! le facteur à utiliser sur leur figure est 2 et non 4) en considérant non pas la zone de mélange comme nous mais les bulles, ce qui revient à diviser par 2 nos résultats pour comparaison.

Le nombre de Reynolds est défini suivant :

$$Re = L L' / \nu. \quad (3.11)$$

La figure 3.8 expose les grandeurs normalisées d'énergie potentielle et cinétique, ainsi que l'énergie de dissipation et le rapport entre l'énergie cinétique et l'énergie de dissipation. Lorsque l'instabilité est initialisée, de l'énergie potentielle K_p est transformée en énergie cinétique K , puis une partie de cette énergie se dissipe Ψ , ainsi :

$$K_P = K + \Psi \quad \text{ou pour Cabot et Cook :} \quad \delta P = K + \Psi \quad (3.12)$$

Nos résultats sont similaires à ceux de Cabot et Cook. Comme nous l'avons vu précédemment, dans le cas d'instabilité de Rayleigh-Taylor à gravitation constante, il est possible de définir un temps t_0 qui permet d'ajuster l'évolution quadratique par rapport au moment où notre mélange est réellement auto-semblable, ce qui produit une meilleure estimation du coefficient de croissance α . Notre coefficient de croissance est un peu plus élevé. Du fait de notre maillage à faible nombre de

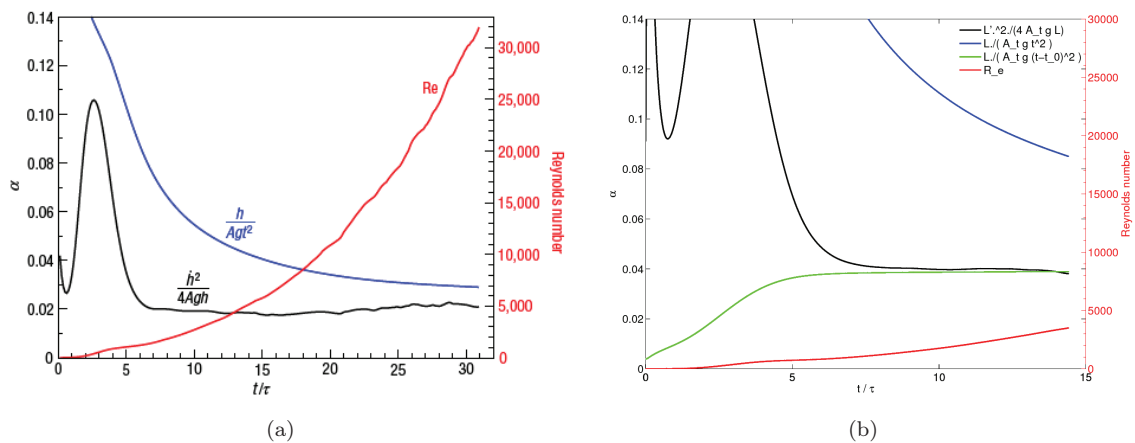


FIG. 3.7 – Évolutions du coefficient de croissance α et du nombre de Reynolds Re : (a) publiées 3072³ [Cabot 2006], et (b) nos résultats 256³. Notre maillage étant moins résolu, nous n'avons pas le même nombre de Reynolds, mais nous avons le même comportement ainsi que le même coefficient de croissance.

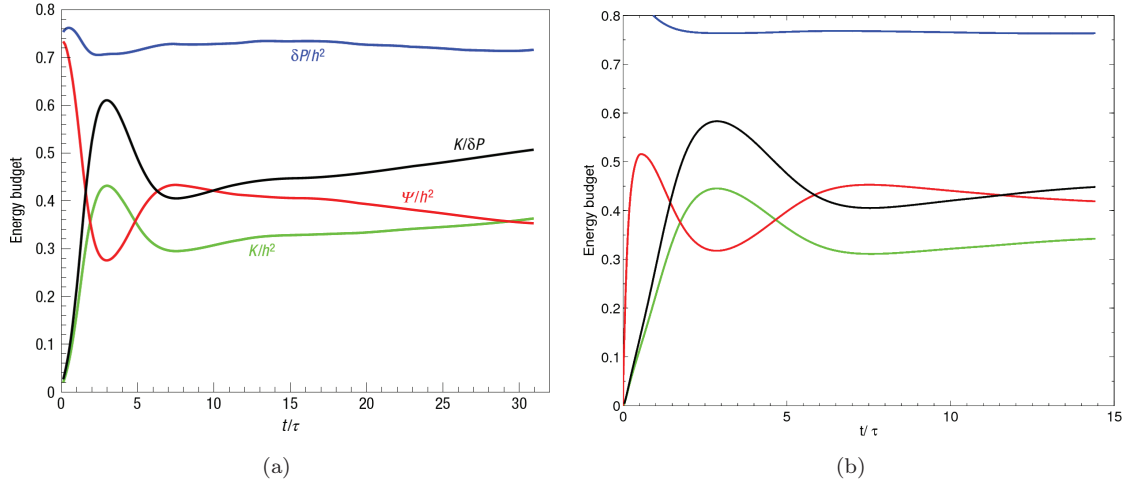


FIG. 3.8 – Évolution des énergies normalisées par la taille de bulle dans le mélange : (a) publiés 3072^3 [Cabot 2006], et (b) nos résultats 256^3 . Entre $t/\tau = 0$ et 15, le bilan de production et dissipation d'énergie est le même pour les deux simulations.

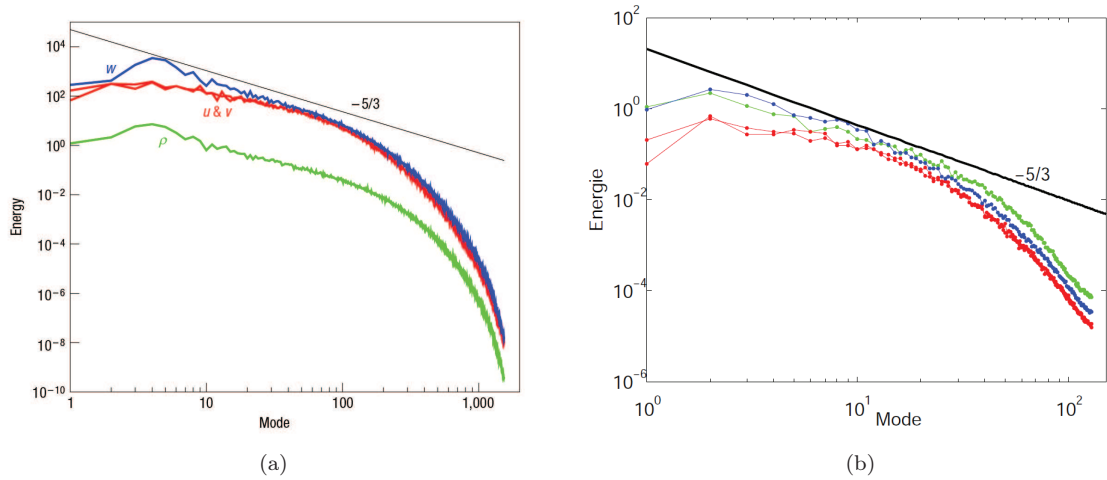


FIG. 3.9 – Spectres d'énergie de la densité ρ et des vitesses u , v et w : (a) publiés 3072^3 [Cabot 2006], et (b) nos résultats pour une simulation de 256^3 mailles. Les deux résultats affichent une cascade inertielle due à la turbulence jusqu'à une échelle de coupure due à la dissipation. Nos résultats sont cependant moins dissipatifs car les spectres d'énergie chutent moins que pour ceux de Cabot et Cook.

noeuds, notre nombre de Reynolds est 10 fois inférieur à celui de Cabot et Cook, mais nous atteignons cependant un régime turbulent assez rapidement. Au niveau du bilan d'énergie, nous obtenons les mêmes valeurs que Cabot et Cook. Nous semblons avoir atteint un équilibre dans le bilan d'énergie, si nous comparons les résultats à nombre de Reynolds équivalent, à $Re = 4000$ soit $t\sqrt{Ag} = 14$, le bilan de Cabot et Cook semble être aussi dans une phase de plateau.

La figure 3.9 représente les résultats de Cabot et nos résultats pour les spectres d'énergie en densité et vitesse. Bien sûr, nous n'avons pas accès à autant d'échelles physiques que la simulation de Cabot et avons un nombre de Reynolds six fois plus faible, mais nous obtenons le même comportement

spectral avec une cascade inertielle et une échelle de dissipation qui correspond bien à celle définie.

3.4 Transfert d'énergie spectral de Cook et Zhou

Nous voulons ici valider nos calculs dans l'espace réciproque.

Comme nous l'avons vu précédemment, dans une instabilité de Rayleigh-Taylor, le mélange initié par la gravitation transforme l'énergie potentielle en énergie cinétique dont une partie se dissipe en chaleur. Il se forme alors une cascade inertielle le long de laquelle l'énergie est transférée des grandes échelles aux petites échelles. Les transferts d'énergie assurent le lien entre les différentes énergies présentes dans le mélange. Cook et Zhou ont étudié ces transferts d'énergie qui opèrent dans le mélange turbulent [Cook 2002]. Dans le cas d'une densité non-uniforme, pour obtenir les équations d'énergie de forme classique qui permettent de faire l'étude dans l'espace réciproque, nous faisons la transformation suivante [Yih 1960] : $v_i = \rho^{1/2} u_i$. On peut alors mettre l'équation de quantité de mouvement sous la forme :

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = G_i + N_i + D_i \quad (3.13)$$

avec :

Terme gravitationnel	$G_i = \rho^{1/2} g_i$
Termes non-linéaires	$N_i = \underbrace{-\frac{\partial v_i u_j}{\partial x_j}}_{\text{convection}} + \underbrace{\rho^{-1/2} \frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{gradient de pression}} + \underbrace{\frac{1}{2} v_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k}}_{\text{dilatation}}$
Termes de viscosité	$D_i = 2\rho^{1/2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right]$

Soient $\hat{v}_i$, $\hat{G}_i$, $\hat{N}_i$, $\hat{D}_i$ les transformées de Fourier transverses de v_i , G_i , N_i et D_i , telles que $\hat{v}_i(\mathbf{k}, z, t) = \mathcal{F}_{xy}\{v(\mathbf{x}, t)\}$, où $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ est le vecteur d'onde. 3.13 devient alors :

$$\frac{\partial \hat{v}_i}{\partial t} = \hat{G}_i + \hat{N}_i + \hat{D}_i \quad (3.14)$$

Soit $v_i^*(\mathbf{k}, z, t)$ le conjugué de $v_i(\mathbf{k}, z, t)$. Si l'on prend le conjugué de 3.14, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\partial \hat{v}_i^*}{\partial t} = \hat{G}_i^* + \hat{N}_i^* + \hat{D}_i^* \quad (3.15)$$

Ainsi en multipliant 3.14 par $\hat{v}_i^*$ et 3.15 par $\hat{v}_i$ et en additionnant les deux équations résultantes, on obtient :

$$\frac{\partial \hat{v}_i^* \hat{v}_i}{\partial t} = \hat{v}_i^* \hat{G}_i + \hat{v}_i \hat{G}_i^* + \hat{v}_i^* \hat{N}_i + \hat{v}_i \hat{N}_i^* + \hat{v}_i^* \hat{D}_i + \hat{v}_i \hat{D}_i^* \quad (3.16)$$

En intégrant l'équation 3.16 suivant des couronnes dans l'espace de Fourier de rayon $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, on obtient l'équation de bilan d'énergie dans le domaine spectral :

$$\frac{\partial}{\partial t} E(k, z, t) = \Pi(k, z, t) + \mathcal{T}(k, z, t) + \mathcal{E}(k, z, t) \quad (3.17)$$

où E est l'énergie cinétique :

$$E = \frac{1}{2} \int (\hat{v}_i^* \hat{v}_i) d^2 k, \quad (3.18)$$

Π est l'énergie injectée par force gravitationnelle :

$$\Pi = \frac{1}{2} \int (\hat{v}_i^* \hat{G}_i + \hat{v}_i \hat{G}_i^*) d^2 k, \quad (3.19)$$

$\mathcal{T}$ est l'énergie transférée par les termes non-linéaires :

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2} \int (\hat{v}_i^* \hat{N}_i + \hat{v}_i \hat{N}_i^*) d^2 k, \quad (3.20)$$

$\mathcal{E}$ est l'énergie dissipée par viscosité :

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int (\hat{v}_i^* \hat{D}_i + \hat{v}_i \hat{D}_i^*) d^2 k, \quad (3.21)$$

où $d^2 k$ est un élément différentiel de l'espace annulaire des vecteurs d'onde.

Les transferts non-linéaires d'énergie dans la zone de mélange turbulent sont engendrés par trois phénomènes, la convection, les variations de pression et les effets de dilatation :

$$\mathcal{T}(k, z, t) = \mathcal{T}_c(k, z, t) + \mathcal{T}_p(k, z, t) + \mathcal{T}_d(k, z, t) \quad (3.22)$$

où

$$\mathcal{T}_m = \oint (\hat{v}_i^* \hat{N}_{m,i} + \hat{v}_i \hat{N}_{m,i}^*) d\sigma \quad m \in [c, p, d], \quad (3.23)$$

et

$$N_{c,i} = -\frac{\partial v_i u_j}{\partial x_j} \quad (3.24)$$

$$N_{p,i} = \rho^{-1/2} \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (3.25)$$

$$N_{d,i} = \frac{1}{2} v_i \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (3.26)$$

Il est ainsi possible d'étudier ces différents termes dans l'espace des fréquences. Cook et Zhou présentent dans leur article les résultats de cette approche pour une zone de mélange turbulent d'une instabilité de RT. Leurs résultats reposent sur une simulation numérique directe de $512^2 \times 2048$ nœuds avec un nombre d'Atwood de $A = 0,5$ et une viscosité cinématique de $\nu = 3 \times 10^{-4}$, notre simulation n'a que $128^2 \times 512$ nœuds mais avec une viscosité de $\nu = 5 \times 10^{-5}$, nous donnant ainsi accès à un nombre de Reynolds $Re = LL'/\nu$ pratiquement équivalent (voir figure 3.10). Le temps est adimensionné par $\sqrt{H/g}$ où H est la largeur de boîte et g la gravité. Toutes les comparaisons présentées ici sont faites pour $t = 3, 4, 5$ et 6 . Les résultats de Cook et Zhou ne sont pas adimensionnés, et nous avons ajusté l'intervalle de couleurs de façon à avoir une saturation des amplitudes des différents termes d'énergie équivalente à la leur.

La figure 3.11 montre les résultats pour le terme d'énergie spectrale E dans le mélange en fonction du nombre d'onde. L'énergie est concentrée aux grandes échelles et décroît ensuite suivant la cascade inertielle au fur et à mesure que nous allons vers les petites échelles. Nos résultats sont cohérents avec ceux de Cook et Zhou, et l'énergie semble cependant être répartie sur plus d'échelles physiques dans notre calcul, ce qui concorde avec le fait que nous avons une viscosité nettement plus faible que la leur, diminuant ainsi l'échelle de dissipation. Le mélange est moins avancé dans notre calcul, ce qui provient du fait que, notre maillage étant moins raffiné, il sous-estime la vitesse d'évolution de la zone de mélange.

La figure 3.12 expose les résultats pour les différents termes de droite de l'équation 3.17. Nous voyons que de l'énergie potentielle Π injecte bien de l'énergie dans le mélange (positive en rouge)

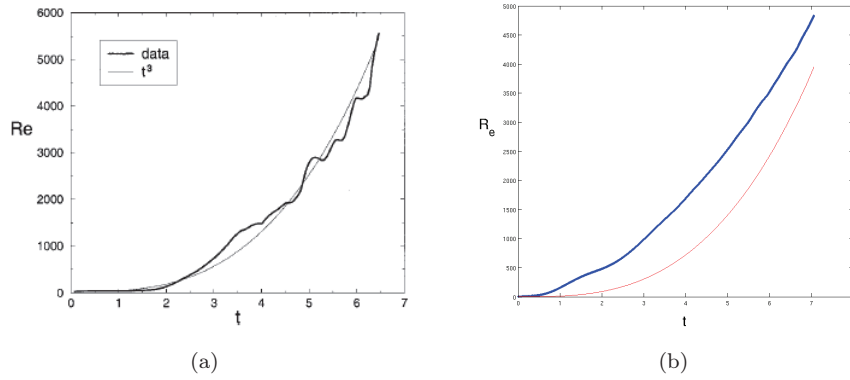


FIG. 3.10 – Évolution du nombre de Reynolds :

(a) résultats de Cook et Zhou [Cook 2002], (b) en bleu nos résultats, en rouge la courbe t^3 . Notre nombre de Reynolds évolue plus rapidement au départ mais semble ensuite ralentir, ce qui pourrait être dû à notre méthode d'adaptation de viscosité cinématique présentée en 2.1.10 et que Cook et Zhou n'utilisent pas.

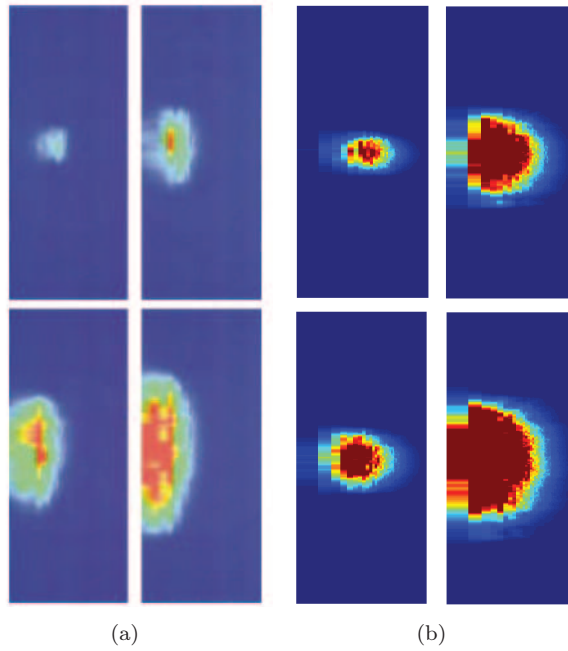


FIG. 3.11 – Spectre d'énergie E suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-même, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec cependant une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation.

grâce à la force gravitationnelle tandis que la dissipation $\mathcal{E}$ enlève de l'énergie au mélange (négative en bleu). La dissipation se fait essentiellement là où les fluides sont turbulents, c'est-à-dire dans le centre de la zone de mélange. Le transfert d'énergie dû aux termes non-linéaires est plus compliqué. Nous voyons qu'aux échelles de la cascade inertielle, le transfert est également positif ou négatif, mettant

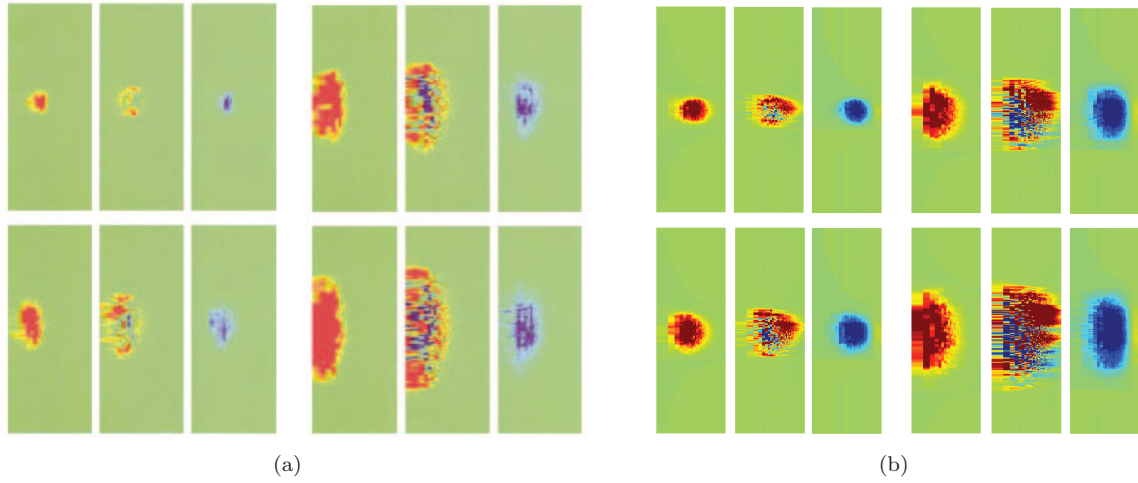


FIG. 3.12 – Pour chaque triplet d’images et de gauche à droite, production Π , transfert $\mathcal{T}$ et dissipation $\mathcal{E}$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation, comme mentionnée en figure 3.11.

en avant le caractère turbulent du mélange et le fait que, suivant le temps, l’énergie peut descendre mais aussi remonter dans la cascade inertielle. En bordure de mélange, le fluide laminaire pur devient mélangé turbulent, il y a donc un transfert d’énergie positif. Aux petites échelles, l’augmentation de la dissipation entraîne une chute de l’énergie dans la cascade inertielle et donc des transferts positifs à ces petites échelles. Les deux codes ont le même comportement général, les différences résultent plus des différents paramètres physiques choisis que des codes eux-mêmes. Ainsi, alors que leurs résultats sont très dissipatifs, les nôtres ne le sont pas assez, les transferts aux petites échelles sont trop grands pour être physiques et on peut même remarquer que la dissipation devient très faiblement positive aux plus grands nombres d’onde. Augmenter un peu la viscosité et diminuer le nombre de Schmidt pour accentuer la diffusion moléculaire résoudrait le problème.

Comme nous l’avons vu, le terme de transfert d’énergie peut être décomposé en trois parties distinctes dues aux termes de convection non-linéaire, aux variations de pression et aux effets de dilatation. La figure 3.13 expose les résultats numériques des termes de transfert par convection et par variation de pression. Les transferts non-linéaires sont essentiellement négatifs dans la zone de mélange et sont positifs en bord de zone de mélange où le fluide devient turbulent. Les transferts par variation de pression sont quasiment opposés aux transferts non-linéaires. Ainsi en bord de zone de mélange, les bulles et aiguilles évoluent en gagnant de l’énergie grâce aux fluides laminares qui deviennent turbulents et en perdant de l’énergie à cause des forces de pression générant de la traînée. Les deux calculs donnent le même comportement général, bien que nos résultats sur les transferts en bord de zone de mélange semblent plus faibles. Ici aussi nous pouvons voir des « taches » aux petites échelles dues à une viscosité trop faible.

Dans leur cas comme dans le notre, les effets de dilatation se résument aux changements de volume dus à la diffusion moléculaire, et le transfert d’énergie par dilatation est donc très faible. La figure 3.14 montre nos résultats ainsi que ceux de Cook et Zhou. Le transfert par dilatation est plus faible de deux ordres de grandeur par rapport aux autres termes de transfert pour les deux calculs. Cependant, la dilatation ne semble pas aussi forte dans notre simulation, ce qui explique aussi pourquoi les petites échelles ne sont pas assez dissipées.

Nous pouvons donc conclure que nos simulations numériques ont donné des résultats de bilan

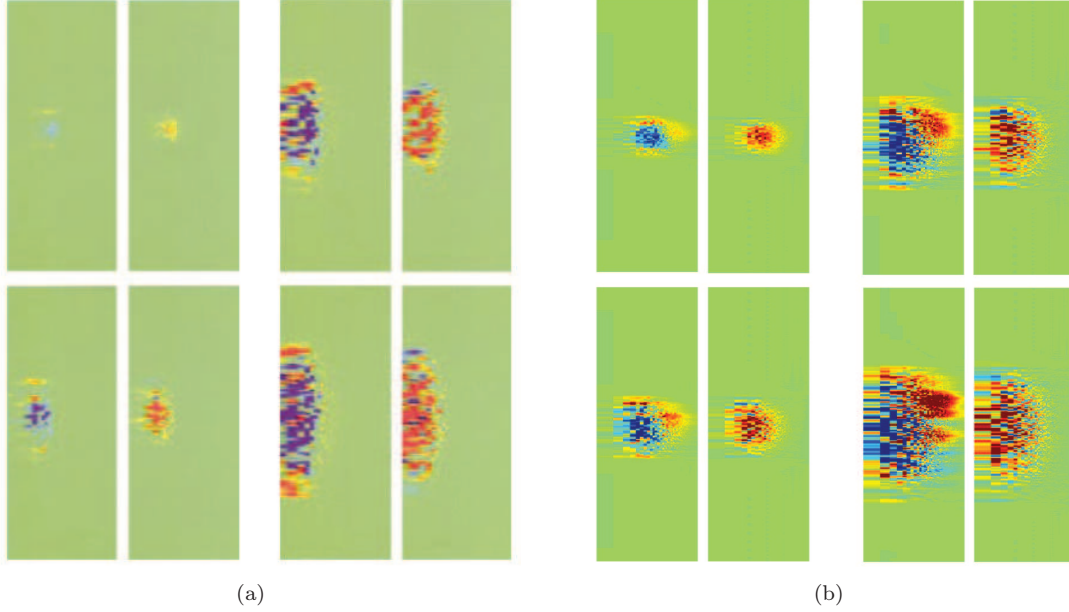


FIG. 3.13 – Pour chaque doublet d’images et de gauche à droite, transferts par convection $\mathcal{T}_c$ et par variation de pression $\mathcal{T}_p$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation, comme mentionnée en figures 3.11 et 3.12.

d’énergie dans l’espace réciproque qui semblent bien corrélés à la physique du mélange.

3.5 Transfert d’énergie spectral dans une instabilité monomode

Grâce à la méthode présentée précédemment, nous étudions ici les transferts d’énergie lors d’une instabilité monomode de Rayleigh-Taylor dans l’espace réciproque.

Dans une instabilité monomode de Rayleigh-Taylor, la bulle de fluide léger qui se forme évolue suivant différentes phases. Après la phase linéaire, la première phase correspond à une évolution auto-semblable durant laquelle l’avancée de la bulle évolue suivant un profil quadratique en temps ; la bulle atteint ensuite une vitesse terminale puis subit une phase de re-accélération. Nous appliquons ici la méthode présentée par Cook et Zhou pour déterminer comment se répartit l’énergie entre la bulle (premier mode) et les tourbillons (modes supérieurs) présents dans le mélange. Nous faisons notre étude sur une simulation $128^2 \times 512$.

Nous voulons étudier l’évolution des énergies et transferts d’énergie dans le temps pour le premier mode et pour les autres modes. Pour cela, il suffit d’intégrer le terme considéré sur toute notre boîte de calcul et sur l’anneau de Fourier considéré. Ainsi les variations d’énergie cinétique pour le premier mode $d_t E_1(t)$ et pour les modes supérieurs (ici de $k = 2$ à $k = 64$) $d_t E_{\text{sup}}(t)$ s’obtiennent selon :

$$d_t E_1(t) = \int_{\text{boîte}} \frac{\partial}{\partial t} E(1, z, t) dz \quad (3.27)$$

$$d_t E_{\text{sup}}(t) = \int_{k=2}^{k=64} \int_{\text{boîte}} \frac{\partial}{\partial t} E(k, z, t) dz dk. \quad (3.28)$$

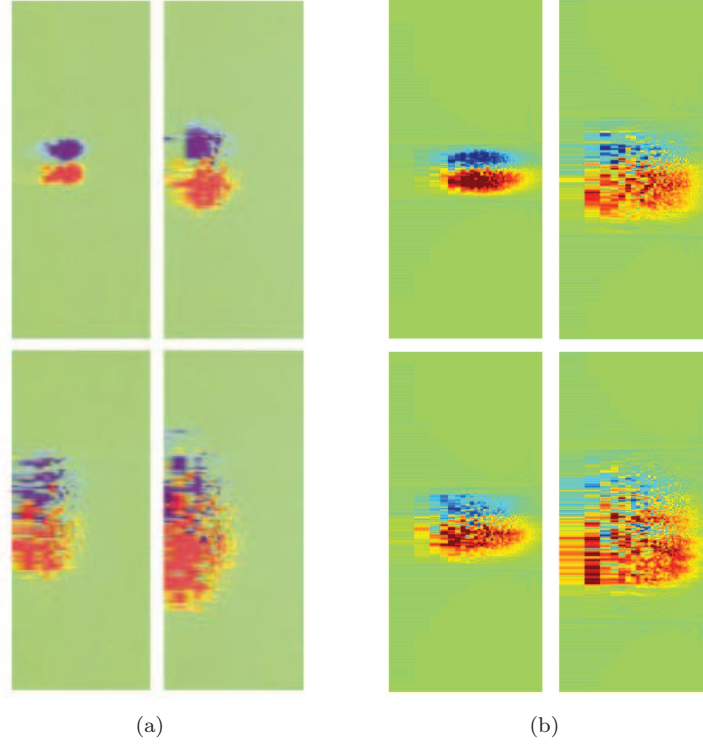


FIG. 3.14 – Pour chaque doublet d’images et de gauche à droite, transfert par dilatation $\mathcal{T}_c$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec toujours la même remarque mentionnée en figures 3.11, 3.12 et 3.13.

Nous sommes aussi intéressés par la production ainsi que les transferts nets d’énergie (les transferts d’énergie non dissipée) aux modes supérieurs :

$$\Pi_{\text{sup}}(t) = \int_{k=2}^{k=64} \int_{\text{boîte}} \Pi(k, z, t) dz dk \quad (3.29)$$

$$\mathcal{T}_{\text{net}}(t) = \int_{k=2}^{k=64} \int_{\text{boîte}} (\mathcal{T}(k, z, t) + \mathcal{E}(k, z, t)) dz dk. \quad (3.30)$$

La figure 3.15 montre les évolutions de ces différents termes. Les points noirs sur la courbe d’évolution des transferts nets d’énergie explicitent les temps pour lesquels est représentée la section du mélange dans la boîte sur la figure 3.16.

La figure 3.15 montre bien une évolution de bulle en trois phases dans la simulation. Durant la première phase, la vitesse de bulle (du mode $k = 1$) augmente et la bulle accumule lentement de l’énergie cinétique ($d_t E_1$ augmente). Au moment où les tourbillons dus à l’instabilité de Kelvin-Helmholtz apparaissent, les modes supérieurs commencent à accumuler de l’énergie ($d_t E_{\text{sup}}$ augmente), la bulle de mode 1 est toujours en accélération mais celle-ci est de plus en plus lente et elle finit par atteindre un palier de vitesse au moment où les tourbillons ont atteint leurs tailles maximales. Durant cette phase, l’énergie accumulée aux modes supérieurs venait en grande partie par transferts d’énergie depuis le mode 1 ($\mathcal{T}_{\text{net}}$ augmente) mais de plus en plus d’énergie potentielle est injectée dans les tourbillons grâce au mélange (Π_{sup} augmente), contribuant d’un tiers à l’accumulation d’énergie dans les tourbillons de mode supérieur à 1. Ensuite la bulle continue d’évoluer et d’accumuler de l’énergie et

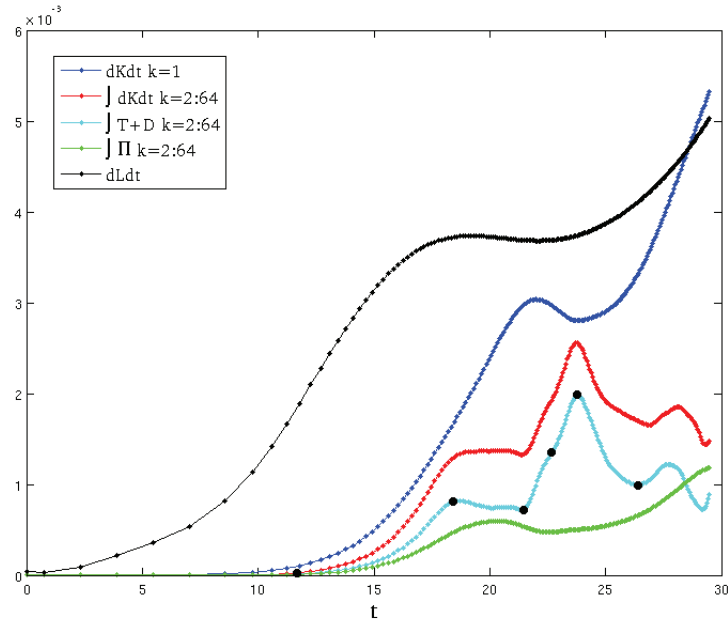


FIG. 3.15 – Évolutions des différents transferts et variations d'énergie. Les points noirs représentent les différentes phases de l'évolution de la bulle exposée en figure 3.16. On peut voir au moment de la formation de la deuxième instabilité de Kelvin-Helmholtz, formant les tourbillons de part et d'autre de la bulle, que les transferts d'énergie aux modes supérieurs à 1 augmentent fortement, générant une diminution de l'énergie cinétique de la bulle de mode 1.

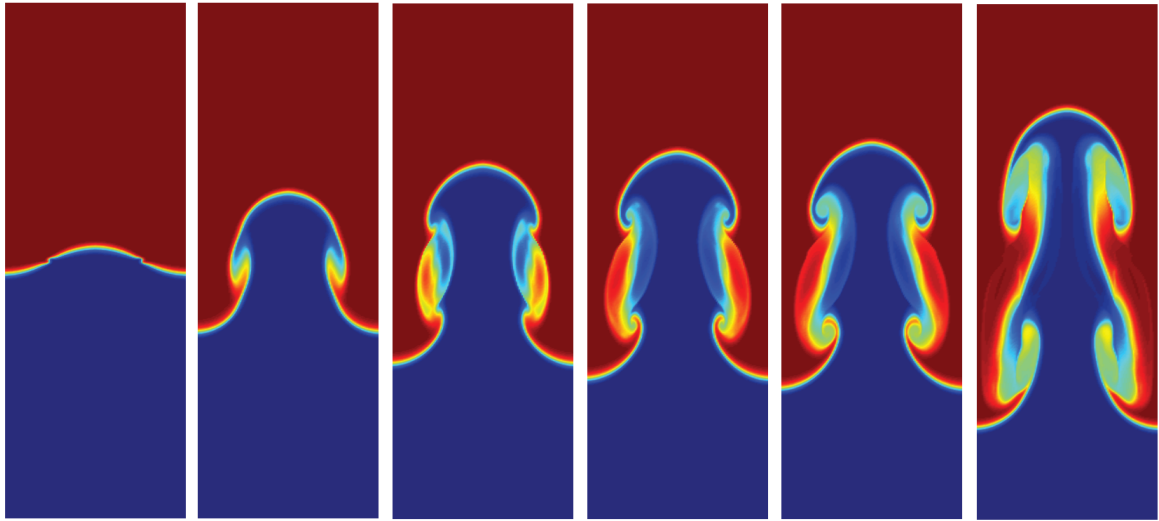


FIG. 3.16 – Cartes en niveau de couleurs de la densité sur la section diagonale de la boîte de calcul pour 6 temps différents. Les différentes étapes exposées ici sont représentées par des points noirs sur la figure 3.15 du bilan de transfert d'énergie.

finit par allonger les tourbillons qui ne peuvent alors plus contenir d'énergie. Nous avons alors un palier dans les transferts d'énergie aux modes supérieurs, mais le mélange dans les tourbillons continue quand même d'injecter de plus en plus d'énergie pour atteindre aussi un maximum et diminuer jusqu'à un stade où les premiers tourbillons ont quasiment disparus pour laisser place à une nouvelle formation de tourbillons par instabilité de Kelvin-Helmholtz. Emportés par la bulle, ces nouveaux tourbillons accumulent alors beaucoup plus d'énergie. Bien que la production d'énergie aux modes supérieurs stagne, les transferts varient beaucoup, au point que la bulle (le mode 1) voit sa variation d'énergie diminuer. Une fois de plus ces tourbillons finissent par s'allonger et retransfèrent leur énergie au mode principal, permettant à la bulle de ré-accumuler de l'énergie cinétique et de ré-accélérer.

3.5.1 Conclusion

Ainsi, à l'examen du bilan d'énergie dans l'espace réciproque dans notre simulation, nous avons pu voir que dans l'instabilité de Rayleigh-Taylor monomode, la bulle atteint une vitesse terminale. Cette vitesse reste alors constante durant un certain temps car les tourbillons annexes créés par instabilité de KH, récupèrent l'énergie et finissent eux aussi par produire assez d'énergie pour influencer sur l'évolution de la bulle de mode principal. Une fois ces tourbillons détruits par l'évolution de la bulle, le mode 1 redevient le seul mode capable d'accumuler de l'énergie et la bulle peut alors ré-accélérer.

Détection de structures

Comme explicité en introduction, la notion de structure est utile pour modéliser la turbulence dans le mélange. Cette notion peut être introduite par analyse de l'équation phénoménologique de flottaison-trainée. Le modèle turbulent 2SFK [Llor 2003b, Llor 2010] a été conçu sur ce concept de structure. Une première validation qualitative de ce modèle a déjà été obtenue mais il n'a pas encore été quantitativement validé. Ainsi, détecter par simulation numérique directe (SND) les structures dans le mélange turbulent d'une instabilité de Rayleigh-Taylor (IRT) permet de comparer les résultats numériques avec ceux du modèle 2SFK afin de le confirmer, l'infirmer ou le corriger.

Le travail effectué dans ce chapitre s'inscrit dans une nouvelle optique de description topologique du mélange turbulent dans l'espace réel. De nombreuses méthodes, utilisant les champs physiques présents dans le mélange pour détecter ces structures topologiques, ont été développées et testées au cours de ce travail avec plus ou moins de succès. Seules les plus efficaces sont présentées ici. Les autres sont présentées succinctement en annexe B. Nous décrivons d'abord ce que nous voulons détecter, à savoir le champ des grandes structures turbulentes dans le mélange, puis nous présentons diverses méthodes de détection de structures. Enfin, nous exposons les différents résultats de détection que nous avons obtenus.

4.1 Que voulons nous détecter ?

Pour assurer une détection aussi complète que possible, il est important de bien définir ce qu'il faut détecter et que l'on appelle des « structures turbulentes » présentes dans le mélange d'une IRT.

4.1.1 Structures turbulentes dans le mélange turbulent d'une instabilité de Rayleigh-Taylor

Comme nous l'avons déjà vu, lorsqu'un champ gravitationnel constant est dirigé d'un fluide dit « lourd » vers un fluide dit « léger » de densité respective ρ_2 et ρ_1 , le fluide léger « pousse » le fluide lourd, les perturbations de l'interface se développent et il se produit alors une instabilité de Rayleigh-Taylor (voir figure 4.1).

L'évolution tardive d'une instabilité de Rayleigh-Taylor produit une zone de mélange turbulent. Les différentes forces de pression, de viscosité et de gravitation contrôlent ce mélange et peuvent être modélisées au travers d'une équation de mouvement 0D non-linéaire appelée l'équation de flottaison-trainée et déjà présentée en introduction :

$$L'' = - \left(\frac{1}{2} + C_T \right) \frac{L'^2}{L} + C_F A g . \quad (4.1)$$

Cette équation établit que la longueur de la zone de mélange évolue suivant l'influence des forces de trainée et de flottaison présentes dans le mélange et représentées respectivement par les coefficients phénoménologiques ajustables sans dimensions C_T et C_F .

Nous voyons ici que l'équation de flottaison-trainée suppose implicitement que l'évolution de la zone de mélange est dictée par l'évolution d'« objets » qui subissent les forces de trainée et de flottaison

induites par l'environnement fluide. Ces objets sont constitués par les fluides eux-mêmes mais doivent présenter une forme de récurrence qui les rendrait assimilables à des solides.

C'est en considérant ces structures turbulentes qu'a été conçu le modèle turbulent 2SFK. Comme représenté sur la figure 4.2, celles-ci apparaissent sous la forme de grandes « langues » de fluide hétérogène et turbulent qui se déplacent dans la zone de mélange.

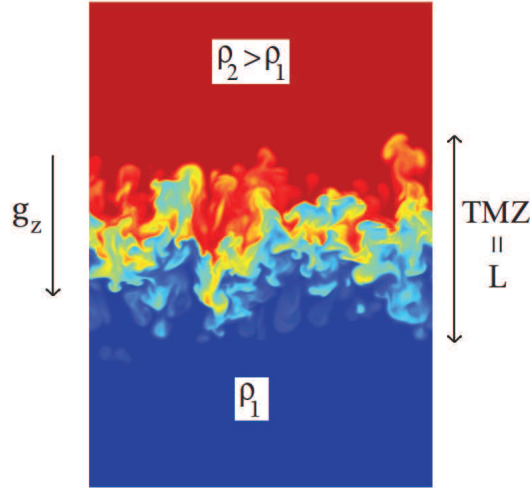


FIG. 4.1 – Carte en niveaux de couleurs de la densité ρ dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D. La gravité étant dirigée vers le bas et des perturbations étant présentes à l'interface, le fluide dit lourd de densité ρ_2 se mélange avec le fluide dit léger de densité $\rho_1 < \rho_2$.

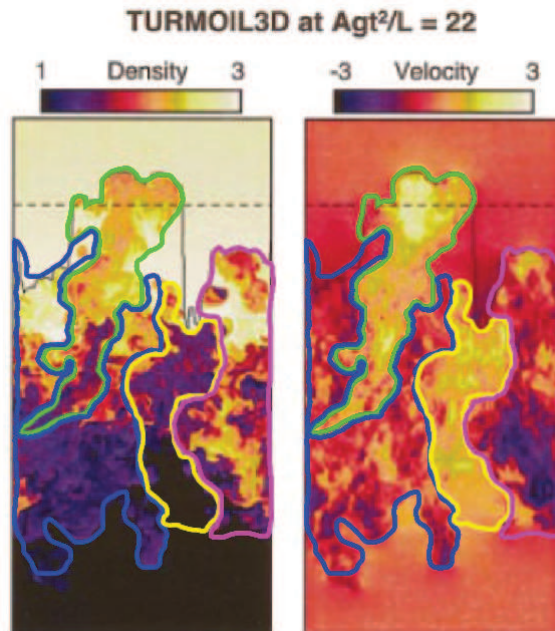


FIG. 4.2 – Schématisation des structures turbulentes, identifiées ici visuellement par leurs contrastes de densité et de vitesse verticale. Chaque courbe de couleur représente une structure turbulente présente dans la zone de mélange. Zone de mélange reproduit de [Dimonte 2004].

Le modèle 2SFK postule que la zone de mélange turbulent peut être décrite par deux champs binaires de présence des structures turbulentes $b^\pm(t, x, y, z)$ complémentaires ($b^+ + b^- = 1$) que l'on peut aussi désigner comme des champs topologiques ou fonctions indicatrices. Les indices hauts « + » et « - » désigneront les structures turbulentes provenant des fluides respectivement lourd et léger. Les méthodes exposées ici ont pour but de détecter ces structures. Il faut donc préciser les différents critères qui définissent les structures turbulentes afin de pouvoir les détecter.

4.1.2 Propriétés d'une structure cohérente

Comme énoncé dans le chapitre 1, l'étude des structures dans les mélanges n'est pas nouvelle. Depuis les années 50, on a remarqué la présence de certains mouvements organisés des fluides dans les écoulements turbulents. On appelle ces mouvements des « structures cohérentes ». Lumley définit ces structures cohérentes de la façon suivante [Lumley 1989] :

« [...] *a coherent structure is a pattern that recurs in the flow.* »

Les structures turbulentes que nous tentons de détecter entrent dans la définition générale établie par Lumley et il est donc approprié d'utiliser les connaissances déjà développées dans ce domaine pour affiner nos critères de détection. Bridges, Husain et Hussain ont élaboré sept critères qui leur semblent être indispensables à une bonne détection de structures cohérentes [Bridges 1989, p.144], et nous nous appuyons donc dessus pour la définition de nos structures turbulentes. Ils sont repris à la suite dans leur texte original en anglais.

Conceptual Basis of CS [Coherent Structure] Eduction :

- « *It is profitable to consider turbulent flow as a collection of spatially discrete vortical structures.* »

Le champ de vorticité est le critère utilisé par Hussain pour définir une structure cohérente. Nous généralisons et postulons, pour notre cas, qu'il est possible de définir des structures turbulentes en utilisant un champ physique ϕ_s (s pour séparateur) qui contient l'information nécessaire à la séparation des structures turbulentes entre-elles. La figure 4.2 montre le résultat d'une séparation qualitative visuelle des structures turbulentes qui s'appuie sur les champs de densité ou de vitesse verticale (ici produit par les simulations de l' α -group). Cette approche permet donc de concevoir que *les structures turbulentes sont des structures cohérentes par un champ ϕ_s* . Nous parlons alors de structures cohérentes en ϕ_s .

- « *The structures which occur within a region of the flow are classified by their topology so that 'representatives' of each class can be studied.* »

La cohérence en ϕ_s permet de détecter les structures présentes dans la zone de mélange. Chaque structure a une cohérence en ϕ_s différente de ses structures voisines. C'est donc le *contraste* de ϕ_s qui permet de différencier les classes dont les structures cohérentes sont les représentantes et de définir la topologie du mélange.

- « *The detail with which we wish to know the flow determines the number of classes of events we define.* »

Comme mentionné précédemment, l'approche du modèle 2SFK est bi-structure, elle décrit donc le mélange suivant deux champs topologiques binaires et complémentaires $b^\pm$. Seules *deux classes d'évènements sont nécessaires : les structures cohérentes en ϕ_s appartenant à la classe b^+ et celles appartenant à la classe b^-* .

- « *The representative of a class of structure is the coherent event. Obviously, instead of trying to study each and every structure that catches our eye, we do better by defining and studying a representative of the structures which draws our attention. The representative is the CS and is the expected value of all the members of the class, obtained by ensemble averaging the structure of a given class together.* »

Le nombre de classes d'évènements est de deux, mais au lieu de n'étudier qu'une seule structure cohérente représentative de chaque classe d'évènements, nous connectons toutes les structures cohérentes qui appartiennent à la même classe. Pour cela, les structures de même classe sont reliées avec le fluide laminaire duquel elles sont issues. Ainsi, selon l'information du champ séparateur ϕ_s , les structures cohérentes détectées iront soit dans b^+ , soit dans b^- . $b^\pm$ représentent donc *des champs de structures cohérentes (ou turbulentes) du mélange*.

- « *Probability distributions of the topological measures determine the classes of structures. The flow data, in whatever form available, is searched for spatial patterns, usually using some broad topological criteria such as peak vorticity magnitude. The selected topological measures of the structures are taken and their joint probability distributions calculated. From these distributions, the structures will be classified by searching for local maxima in the distributions.* »

Dans notre cas, le critère de présence des champs de structures cohérentes $b^\pm$ sera deux pics dans la fonction de distribution du champ séparateur ϕ_s . Plus précisément, sera présent un pic autour d'une valeur Φ_s^+ pour le champ b^+ des structures provenant du fluide lourd et un pic autour d'une valeur Φ_s^- pour le champ b^- des structures provenant du fluide léger. On parle alors de *fonction de distribution bimodale*. Ce critère est appliqué pour chaque altitude z dans la zone de mélange, donc $\Phi_s^\pm(z)$.

- « *The finer details of the topology of the coherent event which were not specified by the classification are the most important part of the coherent event* »

Ce critère explicite le fait que localiser les pics de fonction de distribution ne suffit pas pour faire une détection de structures cohérentes. En effet, le passage d'un pic à l'autre ne se fait pas de façon discontinue, cette frontière « molle » ne permet pas la séparation sans ambiguïté des évènements cohérents détectés, c'est-à-dire le positionnement de l'interface entre b^+ et b^- . Pour pallier ce problème, il faut aussi examiner les quantités qui dépendent de la position de l'interface, et donc des détails fins du champ de structures. Nous pouvons alors obtenir une limite Φ_s^{lim} entre nos classes d'évènements cohérents telle que les quantités étudiées soient *optimales*.

- « *If a set of measures cannot be found whose joint probability distribution have a limited number of peaks, then the CS approach will not be fruitful in that flow.* »

Ce critère est très important : il met en exergue le principe de cohérence des structures turbulentes à détecter. Il y aura alors une réelle cohérence des structures s'il apparaît *des pics $\Phi_s^\pm$ distincts et limités dans la fonction de distribution du champ séparateur ϕ_s* .

Nous avons ainsi défini les différents critères permettant une bonne détection des champs de structures turbulentes. En résumé, ces dernières peuvent être considérées comme *des objets qui se reproduisent* et qui peuvent être détectés en exhibant :

- un *champ séparateur de structures turbulentes ϕ_s* dont la fonction de distribution, pour chaque z , doit être *la plus bimodale possible autour de Φ_s^+ et Φ_s^-* ,
- et une *limite Φ_s^{lim} sur ϕ_s , qui permet de séparer b^+ et b^-* , par l'analyse des quantités dépendantes de la position de l'interface.

De ces propriétés, on obtient alors l'équation générale de détection des champs de structures $b^\pm$:

$$b^+(t, x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi_s(t, x, y, z) > \Phi_s^{\text{lim}}(t, z) \\ 0 & \text{si } \phi_s(t, x, y, z) < \Phi_s^{\text{lim}}(t, z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+ . \quad (4.2)$$

Les critères indispensables à la bonne détection des champs de structures turbulentes dans la zone de mélange ont été présentés. Il faut ensuite définir comment pouvoir les détecter, à savoir quelle fonction ϕ_s et limite Φ_s^{lim} il faut choisir.

4.2 Comment pouvons-nous les détecter ?

Pour détecter les champs $b^\pm$, il faut déterminer plus précisément quel est le champ ϕ_s et quelle est la limite Φ_s^{lim} à utiliser.

Il est difficile de déterminer une frontière précise entre les structures cohérentes. La turbulence du mélange et les échanges de fluide incessants font que les objets ne sont pas bien résolus et présentent des limites floues, en espace et en temps. De ce fait, il est impossible de visualiser et de définir de façon absolue où se trouvent les frontières dans le mélange obtenu par SND. Ce problème est important car il rend les méthodes de détection de structures tributaires du *champ* ϕ_s et de la *limite* Φ_s^{lim} entre les structures. Ainsi, selon les choix retenus, les résultats ne seront pas les mêmes.

4.2.1 Critères des méthodes existantes

À ce jour, nous n'avons trouvé qu'une seule étude de la structuration du mélange turbulent d'une IRT [Laney 2006]. Cependant, ce travail se penche essentiellement sur le phénomène de coalescence des bulles en bord de zone de mélange. Il n'y a alors besoin que de détecter les têtes des structures cohérentes et un travail complexe de reconnexion entre les bulles de part et d'autre de la zone de mélange serait donc nécessaire pour en déduire ici nos champs $b^\pm$. Il semble qu'il n'existe pas à ce jour de méthode de détection complète de structures pour une IRT.

Il existe cependant des méthodes développées pour d'autres types d'écoulements qui pourraient être appropriées aux IRT. Hussain [Bridges 1989, p.144] estime que les structures sont intimement liées à la vorticit  du fluide, soit $\phi_s = \text{rot}(\mathbf{u})$, et a donc développé des techniques de détection par analyse des iso-lignes de vorticit  [Hussain 1981, Hussain 1983, Hussain 1986]. Ainsi, en utilisant ces méthodes par détection des plus grandes iso-lignes de vorticit  ferm es, les structures d tect es seront des tourbillons. Dans le cas des IRT, ce sera les tourbillons aux grandes  chelles pr sents dans les t tes de bulles en bord de zone de m lange.

Dans le domaine des m langes turbulents, la m thode de d tection de structures coh rentes la plus r pandue est la m thode POD pour *Proper Orthogonal Decomposition* de Lumley [Lumley 1967, Rosenfeld 1982, Aubry 1988, Rempfer 1994, Moreau 2006, Eljack 2009]. La POD est une m thode qui consiste   d tecter les structures coh rentes en cherchant une base modale sur laquelle la projection de la vitesse maximise l' nergie cin tique pour les N premiers modes de la base. ϕ_s est donc une fonction qui d pend de la vitesse et de l' nergie. Les structures coh rentes sont alors assimil es aux modes de plus haute  nergie. Dans le cas des IRT, les modes d tect s correspondent alors aux t tes de bulles en bord de zone de m lange.

Ainsi, les structures coh rentes d tect es dans le m lange d pendent de la m thode utilis e. La figure 4.3 expose sch matiquement, pour une IRT, les structures coh rentes que nous voulons d tecter ainsi que les structures coh rentes telles qu'elles seraient d tect es avec les m thodes de Hussain et de Lumley. Les structures coh rentes obtenues avec les m thodes de Hussain et Lumley sont beaucoup plus nombreuses que celles que nous voulons d tecter. Ces m thodes n cessiteraient donc une technique complexe de connexion des structures pour former les deux classes d' v nements $b^\pm$. Elles ne sont donc pas adapt es   l' tude des structures que nous menons ici.

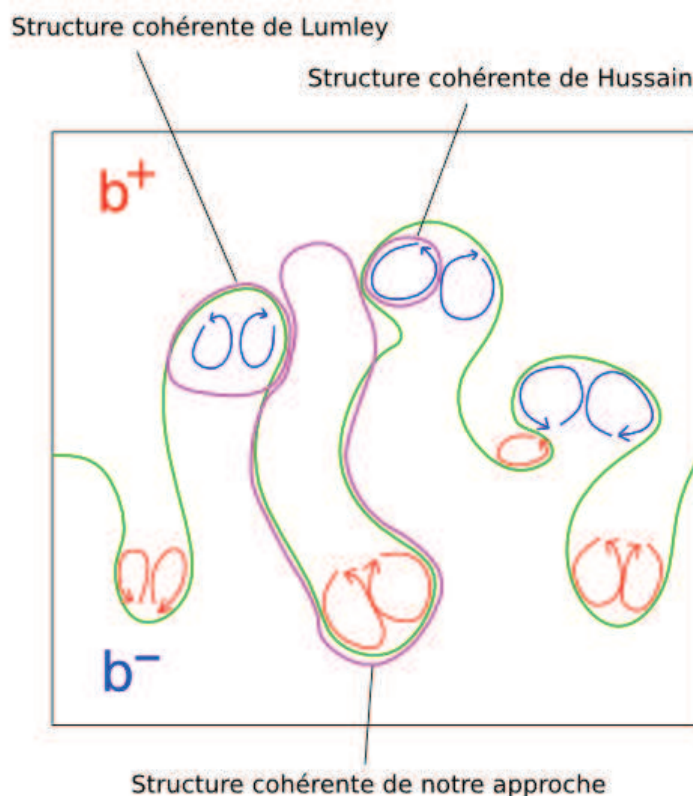


FIG. 4.3 – Schématisation des différentes structures cohérentes à trouver avec notre approche, la méthode de Hussain basée sur la vorticité, et la méthode de Lumley basée sur l'énergie des modes présents dans le mélange.

Une autre méthode pourrait être utile : les ondelettes. D'abord utilisées pour l'analyse et le traitement d'images, les méthodes statistiques d'analyse par ondelettes [Morlet 1983, Meyer 1991] sont aussi de plus en plus utilisées pour l'étude de mélanges turbulents [Farge 1992]. Leur principe est d'étudier la répartition statistique du jeu de données par projection sur une base déterminée par la théorie des ondelettes. Nous pouvons citer notamment le travail remarquable d'analyse topologique du mélange tri-dimensionnel de l'instabilité de Kelvin-Helmholtz de Do Khac, Basdevant [Do Khac 1998]. Ici, ϕ_s est une fonction qui ne dépend que de la répartition statistique de la vitesse. La méthode des ondelettes est donc très puissante pour la détection de structures, mais elle est aussi trop complexe pour le niveau de détail de détection que nous voulons. Cette méthode n'est donc pas retenue ici.

Ainsi, bien que nombreuses, les méthodes de détection existantes ne remplissent pas les conditions voulues. Nous avons donc développé notre propre approche.

4.2.2 Critères des méthodes développées pour notre cas d'étude

Comme exposé précédemment, les méthodes existantes utilisent des critères trop éloignés de ceux nécessaires à une détection appropriée des structures turbulentes au sens de la modélisation de type 2SFK. De nouvelles méthodes ont dû alors être développées et leurs critères sont spécifiques au comportement d'une IRT. Nous présentons ici les critères généraux qu'il faut remplir pour assurer une bonne détection.

4.2.2.1 Choix de la fonction ϕ_s

Une des propriétés importantes d'une IRT est son comportement anisotrope nettement marqué par rapport aux couches turbulentes classiques [Llor 2003a]. Cette anisotropie de l'écoulement due au terme gravitationnel entraîne un contraste, suivant la direction de la gravitation (ici la direction z), de la plupart des champs physiques du mélange.

Le premier contraste auquel on peut penser est celui en vitesse verticale. Ainsi, il est possible d'identifier le champ b^+ comme celui des structures à vitesse verticale négative et le champ b^- comme celui des structures à vitesse verticale positive. En postulant que les profils moyens de fractions volumiques $\alpha^\pm$ sont linéaires le long de la zone de mélange, les profils moyens de vitesse $U^\pm$ suivant z sont alors obtenus via l'équation de conservation de la masse conditionnée par $\alpha^\pm$ (voir figure 4.4). Ainsi, à t et z donnés, les valeurs $\Phi_s^\pm(t, z) = U^\pm(t, z)$ des pics principaux de la fonction de distribution sont connues.

D'autres contrastes existent. La figure 4.5 montre les profils de vitesse, densité, énergie cinétique et dissipation de l'énergie cinétique dans les champs de structures $b^\pm$ obtenus avec le modèle 2SFK. Des contrastes dus à l'anisotropie de l'IRT existent pour tous ces champs. Il est donc possible, en principe, d'exploiter l'information donnée par chacun de ces champs pour faire de la détection de structures.

Quel que soit le champ retenu, les structures turbulentes dans le mélange peuvent être détectées grâce aux profils des pics principaux $\Phi_s^\pm(z)$ de la fonction de distribution de ϕ_s que suivent ces structures. Les profils 1D de ces champs conditionnés par $b^\pm$ suivant z donnent alors les profils $\Phi_s^\pm(z)$. Cependant, comme le montre la figure 4.5, ces profils pour la vitesse et la densité ne se croisent jamais alors que ceux pour l'énergie et la dissipation se croisent en $z = 0$. Dans ce dernier cas, l'attribution des structures $\pm$ aux champs $b^\pm$ doit être inversée lorsque l'on passe de $z < 0$ à $z > 0$. Cette discontinuité induit alors une discontinuité dans les champs de structures et dans les statistiques que nous calculons ensuite. Nous retiendrons donc seulement les champs de vitesse verticale u_z et de densité ρ comme champs séparateurs potentiels.

Comme le montre la figure 4.5, la densité ρ n'est pas nulle en moyenne, sa fonction de distribution n'est donc pas centrée autour de 0, ce qui complique la visualisation des structures turbulentes dans le champ séparateur et la comparaison avec la méthode utilisant u_z . Il est plus facile de travailler sur les champs de fluctuation de vitesse $\phi_s = u' = u_z - \overline{u_z}$ ou de densité $\phi_s = \rho' = \rho - \overline{\rho}$, où $\overline{\phi}$ est la moyenne de ϕ pour chaque z . Ici, le champ de fluctuation permet d'étudier la répartition statistique des valeurs de vitesse et de densité autour de leur valeur moyenne.

Un élément primordial pour la détection est que les pics principaux $\Phi_s^\pm(t, z)$ soient clairement distincts l'un de l'autre : une fonction de distribution regroupée autour de deux modes distincts est dite bimodale. Pour étudier cette propriété nous introduisons le coefficient de bimodalité.

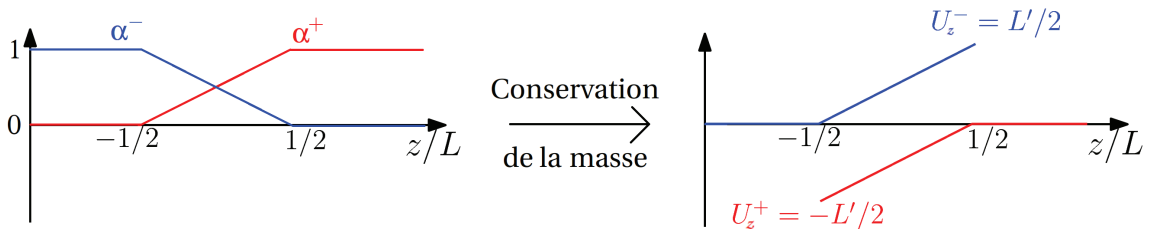


FIG. 4.4 – En prenant pour $\alpha^\pm$ des profils linéaires complémentaires, nous trouvons les profils 1D qualitatifs suivant z des vitesses verticales $U_z^\pm$ des structures $\pm$.

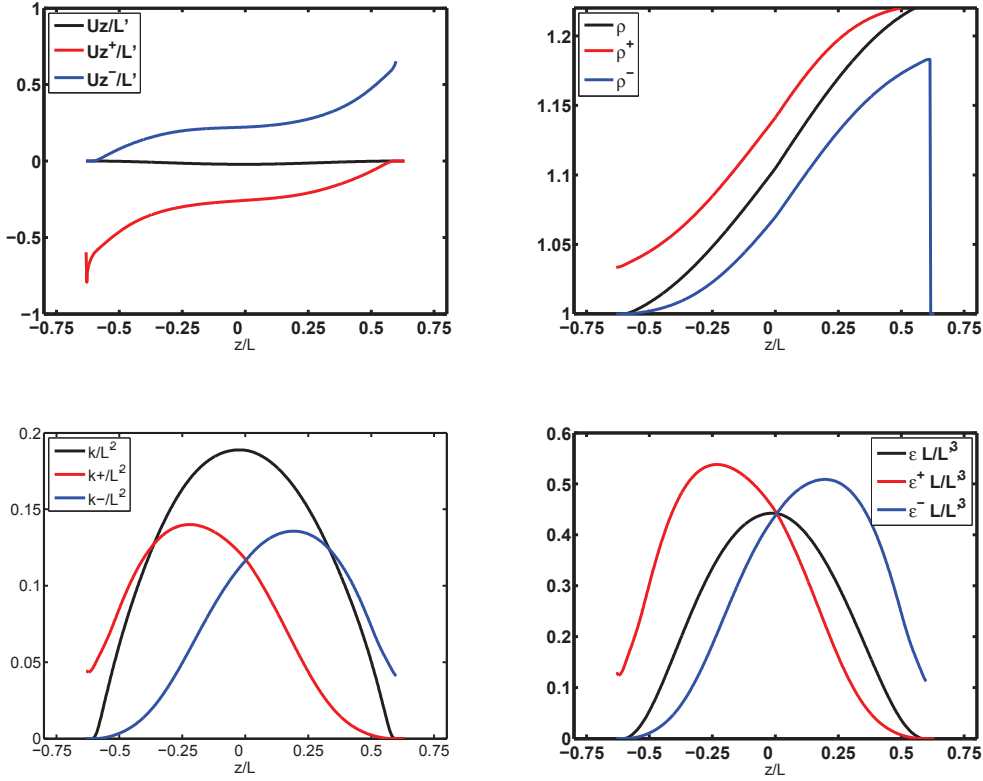


FIG. 4.5 – Profils suivant z des vitesses verticales $U^\pm$, densité $\rho^\pm$, énergies cinétiques turbulentes $k^\pm$ et dissipations de l'énergie cinétique turbulente $\varepsilon^\pm$ dans les structures $\pm$. Le contraste présent dans chaque quantité et généré par la gravité permet de faire une détection bi-structure du mélange.

4.2.2.2 Coefficient de bimodalité

Un indicateur de bimodalité général doit produire un résultat toujours identique et spécifique pour les distributions parfaitement bimodales. La fonction de distribution d'une variable aléatoire X est dite parfaitement bimodale si elle est définie par deux modes discrets distincts X_1 et X_2 de probabilités respectives p et $1-p$. Pour des raisons de clarté et sans perte de généralité, nous exposons les calculs dans le cas $X_1 = 1$ et $X_2 = 0$. Un coefficient de bimodalité est ici construit à partir des moments d'ordre 2, 3 et 4 dont les valeurs pour la distribution parfaitement bimodale sont donc :

$$\overline{X} = p, \quad (4.3)$$

$$M_2 = \overline{(X - \overline{X})^2} = p(1-p), \quad (4.4)$$

$$M_3 = \overline{(X - \overline{X})^3} = p(1-p)(1-2p), \quad (4.5)$$

$$M_4 = \overline{(X - \overline{X})^4} = p(1-p)(1-3p+3p^2), \quad (4.6)$$

où, pour notre application, $\overline{X}$ est la moyenne sur la section de la boîte de calcul à z donné.

Pour caractériser cette distribution bimodale pure, nous devons trouver une relation entre les différents moments explicités ci-dessus. La première puissance commune aux trois derniers moments est p^6 , ce qui donne l'égalité à l'ordre 6 suivante :

$$M_4 M_2 - M_3^2 - M_2^3 = 0. \quad (4.7)$$

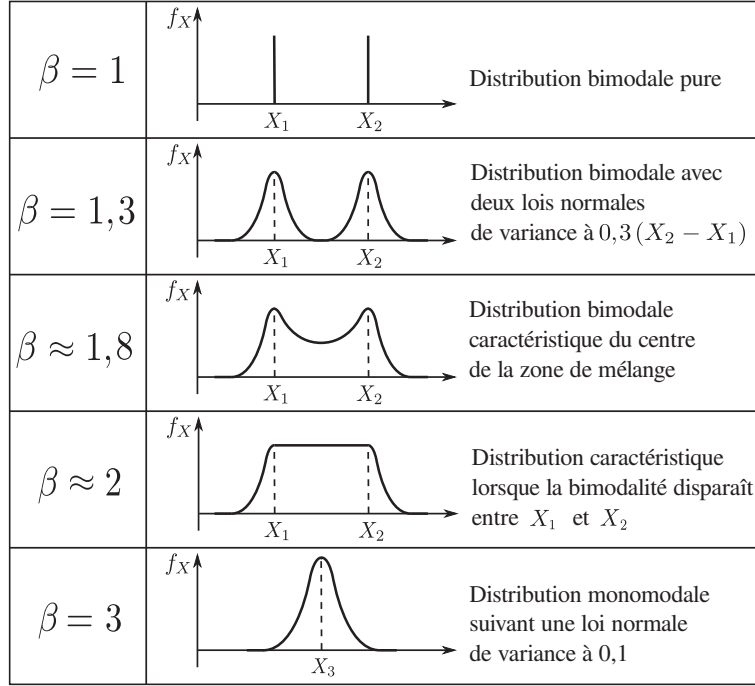


FIG. 4.6 – Valeurs du coefficient de bimodalité β pour différentes distributions rencontrées lors de nos analyses. Au dessus de $\beta \approx 2$, la distribution ne peut plus être considérée comme bimodale.

Ainsi, si la distribution étudiée est purement bimodale alors l'équation 4.7 est vérifiée, et le coefficient de bimodalité :

$$\beta = \frac{M_4 M_2 - M_3^2}{M_2^3}, \quad (4.8)$$

est égal à 1. Ce coefficient de bimodalité n'est autre que le coefficient dit de kurtosis ou de normalité auquel nous avons ajouté le moment d'ordre 3 afin de supprimer l'impact des asymétries en amplitude de la fonction de distribution étudiée. On peut montrer que pour tout autre type de distribution, β sera supérieur à 1. La figure 4.6 représente différentes distributions rencontrées durant l'analyse des distributions de ϕ_s dans le mélange. La valeur du coefficient de bimodalité résulte de calculs de moyennes à z donné, donc β est une fonction de z (et de t).

Ainsi, en regardant le coefficient de bimodalité $\beta^\phi(z)$ de la fonction de distribution du champ séparateur ϕ_s , il est possible de vérifier si sa distribution peut-être considérée comme bimodale ou non.

Il faut maintenant examiner la définition du seuil afin d'obtenir la meilleure séparation possible entre les deux champs indicateurs de présence $b^\pm$.

4.2.2.3 Choix de la limite Φ_s^{lim}

Comme mentionné plus haut, la turbulence du mélange rend ambigüe la visualisation des frontières entre structures. La détection de structures est donc tributaire des choix de ϕ_s et Φ_s^{lim} . Il semble alors naturel d'optimiser cette détection suivant nos critères de détection. Le critère de pics $\Phi_s^\pm(z)$ bien distincts est important. Les méthodes développées doivent donc trouver le bon Φ_s^{lim} de façon à obtenir la meilleure séparation possible de Φ_s^+ et Φ_s^- . Pour cela, nous utilisons une approche statistique.

Soit $p(X)$ la fonction de distribution d'un champ présentant une bimodalité. Soit la valeur X^{lim} qui assure une séparation optimale des deux modes. Considérons $H^\pm(X - X^{\text{lim}})$ comme les fonctions

marche en amont et aval de X^{lim} . Les moyennes d'une fonction $f(X)$ sur le domaine amont et aval de X^{lim} sont respectivement :

$$\int_{-\infty}^{X^{\text{lim}}} f(X)p(X)dX = \overline{H^+f} \quad \text{et} \quad \int_{X^{\text{lim}}}^{+\infty} f(X)p(X)dX = \overline{H^-f}. \quad (4.9)$$

On trouve alors que $\overline{H^+} + \overline{H^-} = 1$.

Nous considérons le second moment M_2 utilisé dans l'indicateur de bimodalité et pouvons le développer en utilisant les fonctions marche amont et aval :

$$\begin{aligned} M_2 &= \overline{X^2} - \overline{X}^2 \\ &= \overline{(H^+ + H^-)X^2} - \overline{(H^+ + H^-)X}^2 \\ &= \left(\overline{H^+X^2} - \frac{\overline{(1-H^-)}}{\overline{H^+}} \overline{H^+X^2} \right) + \left(\overline{H^-X^2} - \frac{\overline{(1-H^+)}}{\overline{H^-}} \overline{H^-X^2} \right) - 2\overline{H^+X} \overline{H^-X} \\ &= \overline{H^+} \left(\frac{\overline{H^+X^2}}{\overline{H^+}} - \frac{\overline{H^+X}^2}{\overline{H^+}^2} \right) + \overline{H^-} \left(\frac{\overline{H^-X^2}}{\overline{H^-}} - \frac{\overline{H^-X}^2}{\overline{H^-}^2} \right) + \overline{H^+} \overline{H^-} \left(\frac{\overline{H^+X}}{\overline{H^+}} - \frac{\overline{H^-X}}{\overline{H^-}} \right)^2 \\ M_2 &= \overline{H^+}M_2^+ + \overline{H^-}M_2^- + M_2^s. \end{aligned} \quad (4.10)$$

M_2 peut se décomposer suivant trois termes : les deux variances $M_2^\pm$ des distributions partielles en amont et en aval de X^{lim} , et une contribution M_2^s liée à l'écart entre les moyennes amont et aval. Ce dernier terme M_2^s quantifie la séparation statistique des deux pics pour une distribution bimodale.

Dans le cas où X est le champ séparateur ϕ_s , on a :

$$M_2^s(\phi_s) = \overline{H^+} \overline{H^-} \left(\frac{\overline{H^+\phi_s}}{\overline{H^+}} - \frac{\overline{H^-\phi_s}}{\overline{H^-}} \right)^2, \quad (4.11)$$

or :

$$\Phi_s^\pm = \frac{\overline{H^\pm\phi_s}}{\overline{H^\pm}}, \quad (4.12)$$

la contribution statistique inter-structure du second moment s'écrit alors :

$$M_2^s(\phi_s) = \overline{H^+} \overline{H^-} (\Phi_s^+ - \Phi_s^-)^2. \quad (4.13)$$

La séparation de Φ_s^+ et Φ_s^- sera donc considérée ici comme optimale lorsque M_2^s est maximal. Cette méthode reprend en fait l'approche statistique développée en traitement d'image par Otsu [Otsu 1979] pour faire de la détection de forme.

4.2.3 Simulations numériques effectuées pour l'étude des méthodes de détection

Les simulations numériques, effectuées pour la comparaison des différentes méthodes présentées ici, ont été faites dans une boîte de calcul de 128^3 mailles et de dimensions $1 \times 1 \times 1$. Le faible nombre de mailles a permis d'obtenir rapidement de nouveaux résultats durant le travail de comparaison. L'instabilité de Rayleigh-Taylor est simulée pour un nombre d'Atwood de $A = 0,1$. La viscosité cinématique ν est adaptée de façon à avoir une échelle de dissipation de l'ordre de la taille de maille. La simulation donne un coefficient de croissance α de 0,038.

Bien sûr, du fait du nombre de mailles raisonnable, notre simulation souffre d'un régime transitoire assez long qui ne s'efface pour donner un régime auto-similaire qu'à partir de $L = 1/2$. La turbulence

est assez faible, en fin de mélange le nombre de Reynolds $Re = LL'/\nu$ est de 1500. L'écoulement n'est donc pas turbulent, cependant les termes non-linéaires sont assez forts pour engendrer un comportement stochastique du fluide, ce qui est suffisant pour son utilisation ici. Dès lors, la simulation comporte toute l'information nécessaire pour choisir la méthode de détection optimale.

La figure 4.7 montre les cartes de densité obtenues aux instants $t_1 = 2,2$ et $t_2 = 5,2$. Le temps est exprimé en unités de $\sqrt{H/g}$, où $H = 1$ est la largeur de la boîte de calcul.

Pour chaque méthode de détection, nous regardons la topologie du champ de structures obtenu ainsi que la fonction de distribution et le coefficient de bimodalité du champ séparateur ϕ_s utilisé.

4.3 Méthodes non-intrusives : utilisation des champs instantanés u' et ρ'

Une méthode est dite non-intrusive lorsqu'elle peut être utilisée en post-traitement : elle ne nécessite alors pas d'être incorporée dans le code de simulation numérique utilisé. Comme mentionné plus haut, nous avons décidé de faire une détection de structures en utilisant l'information donnée par le champ instantané de fluctuations de vitesse verticale u' ou de fluctuations de densité ρ' , et en séparant b^+ et b^- de façon à maximiser respectivement le terme $M_2^s(u')$ ou $M_2^s(\rho')$.

4.3.1 Résumé de l'approche

En résumé, la méthode non-intrusive de détection présentée ici est basée sur l'algorithme de calcul suivant :

1. déterminer le champ séparateur ϕ_s comme u' ou ρ' ,
2. calculer, pour toute valeur de Φ_s^{opt} , les champs de structures $b^\pm$ selon :

$$b^+(t, x, y, z, \Phi_s^{\text{opt}}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi_s(t, x, y, z) > \Phi_s^{\text{opt}}(z) \\ 0 & \text{si } \phi_s(t, x, y, z) < \Phi_s^{\text{opt}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+, \quad (4.14)$$

et calculer, pour chaque champ de structures $b^\pm(\phi_s^{\text{opt}})$, la contribution statistique $M_2^s(t, z, \Phi_s^{\text{opt}})$ selon :

$$M_2^s(z, \Phi_s^{\text{opt}}) = \overline{H^+} \overline{H^-} \left(\frac{\overline{H^+ \phi_s}}{\overline{H^+}} - \frac{\overline{H^- \phi_s}}{\overline{H^-}} \right)^2 \quad (4.15)$$

3. déterminer la courbe de limite optimale $\Phi_s^{\text{lim}}(z) = \Phi_s^{\text{opt}}(z)$ tel que $M_2^s(z, \Phi_s^{\text{opt}}(z)) = \max_{z, \Phi_s^{\text{opt}}} M_2^s$,
4. calculer les champs de structures optimaux $b^\pm(t, x, y, z, \Phi_s^{\text{lim}})$.

4.3.2 Détection avec $\phi_s = u' = u_z - \overline{u_z}$

La détection de structures en prenant le champ instantané des fluctuations de vitesse verticale comme champ séparateur $\phi_s = u'$ suit les conditions :

$$b^+(t, x, y, z, u'^{\text{lim}}) = \begin{cases} 1 & \text{si } u'(t, x, y, z) < u'^{\text{lim}}(z) \\ 0 & \text{si } u'(t, x, y, z) > u'^{\text{lim}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+. \quad (4.16)$$

4.3.2.1 Maximisation de l'énergie dirigée k_d

Nous cherchons à maximiser la contribution inter-structure $M_2^s(u')$ pour trouver la meilleure séparation possible de $U'^\pm$. $M_2^s(u')$ se met sous la forme :

$$M_2^s(u') = \overline{H^+} \overline{H^-} (U'^+ - U'^-)^2, \quad (4.17)$$

et représente alors l'énergie dirigée $K_d = B^+ B^- (U^+ - U^-)^2 / 2$ ($U'^{\pm} \approx U^{\pm}$), présentée en introduction et qui est centrale pour les approches bi-fluides ou bi-structures. L'intérêt de ces approches réside en effet dans la construction d'une énergie dirigée la plus grande possible, autrement dit de la meilleure séparation possible de $U^{\pm}$. Ainsi, dans le cas d'une détection utilisant la vitesse verticale, la séparation optimale des champs de structures $b^{\pm}$ permet d'obtenir une énergie dirigée k_d maximale.

4.3.2.2 Topologie du champ de structures

Les figures 4.8(a), 4.8(b), 4.9(a) et 4.9(b) montrent respectivement les cartes des champs de fluctuations de vitesse verticale u' et de présence de structures b^+ d'une simulation numérique aux deux instants t_1 et t_2 . La méthode décrite ci-dessus donne une bonne première idée de la disposition des structures dans la zone de mélange.

- Au temps t_1 , le mélange est encore faiblement turbulent, la vitesse fluctue peu et les structures sont bien corrélées à la carte de la vitesse verticale mais aussi à la carte de la densité (voir figure 4.7(a)). Un léger décalage avec la densité est toutefois présent en bordure de mélange : la frontière des structures se trouve à l'intérieur des bulles de fluide.
- Au temps t_2 , le champ de structures b^+ reste logiquement bien corrélé avec le champ de vitesse u' , mais significativement moins bien avec la densité ρ en bord de zone de mélange. L'effet déjà visualisé au temps t_1 est renforcé. En effet, la turbulence force le mélange des deux fluides, cela implique qu'en bordure de zone de mélange la structure turbulente se confond avec le champ de densité contrasté par rapport au fluide laminaire environnant. Cette corrélation imparfaite avec le champ de densité en bordure de zone de mélange est peu satisfaisante vis-à-vis des critères de détection décrit plus haut.

La détection de structures par la vitesse verticale semble créer des défauts de topologie. Ceux-ci sont induits par différentes caractéristiques du champ de vitesse verticale.

- Sur la figure 4.9(a), des *zones de re-circulation* sont présentes sur la bulle montante de fluide lourd la plus haute à gauche de la zone de mélange : on y observe des zones de fluide qui ont une vitesse instantanée négative, et la méthode non-intrusive de détection attribuera ces zones à des structures $+$ alors qu'elles devraient être attribuées à des structures $-$.
- De plus, cette bulle, montant à une vitesse non-négligeable, déplace du fluide laminaire autour du *point d'arrêt* (ou point de stagnation) qui acquiert donc une certaine vitesse ; la méthode non-intrusive associera alors ce fluide laminaire à la structure turbulente montante $-$ alors qu'il devrait faire partie de la structure $+$.
- Le groupe des trois bulles montantes de droite, sur la figure 4.9(a), expose un autre problème de point de stagnation. En effet, ces bulles montent mais à une *vitesse faible*, la présence du point d'arrêt diminue alors la valeur de la vitesse instantanée en dessous du seuil de détection de la méthode non-intrusive. La détection de la structure montante est donc incomplète et une partie de la structure $+$ se voit être attribuée à la structure $-$.

4.3.2.3 Fonction de distribution et bimodalité

Dans le cas d'une distribution bimodale, les valeurs locales du champ ϕ_s sont concentrées autour de deux valeurs distinctes $\Phi^{\pm}$, la fonction de distribution $p(\phi_s)$ de ϕ_s est alors formée de deux pics autour des modes $\Phi^{\pm}$. La fonction de distribution du champ de fluctuations de vitesse verticale $\phi_s = u'$ est calculée sur chaque section $S(z)$ de la boîte de calcul. Le résultat donne alors une carte bidimensionnelle $p(u', z)$.

Les figures 4.10(a) et 4.10(b) représentent, aux deux instants t_1 et t_2 , la fonction de distribution $p(u'/L', z/L)$ des fluctuations de la vitesse verticale normalisées u'/L' en fonction de z/L , ainsi que la courbe de séparation optimale $u'^{\text{lim}}(z/L)/L'$.

- Au temps t_1 , l'écoulement est faiblement turbulent, les fluctuations en vitesse des particules de fluide sont encore faibles, la fonction de distribution présente alors deux profils de pics bien

distincts qui reprennent les profils de vitesse de la figure 4.4. Cependant, ces profils ne sont bien définis que sur l'intervalle $[-0, 25; 0, 25]$.

- Au temps t_2 , le mélange est totalement turbulent, ou du moins stochastique, la répartition statistique de la vitesse est étalée sur toute la gamme de valeurs accessibles et la fonction de distribution a perdu tout comportement bimodal. Au centre de la zone de mélange, un seul maximum subsiste, dénotant une distribution monomodale. Seuls les pics en bordure de zone de mélange du fluide laminaire apparaissent encore de façon bien définie. Les fluctuations de vitesse rendent alors impossible une quelconque apparition des deux pics $U'^{\pm}$ recherchés.

Les figures 4.11(a) et 4.11(b) représentent les profils du coefficient de bimodalité $\beta^{u'}$ suivant z/L aux temps t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , les profils des pics sont bien définis dans l'intervalle $[-0.25, 0.25]$, et la bimodalité est assez bonne au centre de la zone de mélange. Au delà, le coefficient de bimodalité se détériore rapidement pour prendre une valeur supérieure à celle pour la loi uniforme, soit 2,0. On peut noter cependant que la correction d'asymétrie en amplitude par le moment d'ordre 3, M_3 , n'est pas totalement efficace pour des distributions très asymétriques, ce qui explique en partie la dégradation du coefficient de bimodalité en bordure de zone de mélange.
- Au temps t_2 , la turbulence est installée et le champ de fluctuations de vitesse u' est devenu monomodal. Le coefficient $\beta^{u'}$ a une valeur grande même au centre de la zone de mélange.

4.3.3 Détection avec $\phi_s = \rho' = \rho - \bar{\rho}$

La détection de structures en prenant les fluctuations de la densité comme champ séparateur $\phi_s = \rho'$ suit les conditions :

$$b^+(t, x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho'(t, x, y, z) < \rho'^{\text{lim}}(z) \\ 0 & \text{si } \rho'(t, x, y, z) > \rho'^{\text{lim}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+, \quad (4.18)$$

4.3.3.1 Topologie du champ de structures

Les figures 4.8(c), 4.8(d), 4.9(c) et 4.9(d) montrent respectivement les cartes des fluctuations de densité ρ' et de présence de structures b^+ construites avec ρ' , aux deux mêmes instants t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , la corrélation est bonne pour les deux champs de densité et vitesse. Bien que la turbulence soit faible, des différences avec la détection par u' sont déjà notables. Le champ b^+ obtenu par ρ' suit mieux l'interface en densité et vient donc mieux englober les structures. On remarque pourtant la coupure d'une des structures descendantes à gauche de la zone de mélange.
- Au temps t_2 , le champ de structures b^+ est bien corrélé avec le champ de densité ρ en bordure de mélange. Cependant, cela produit une fragmentation des structures globalement plus importante.

La détection de structures par la densité ρ' introduit aussi des défauts de topologie dus à la présence de zones *hétérogènes* de fluide entraînant de fortes fluctuations de densité : ainsi, comme le montre la figure 4.9(d), la longue bulle montante, sur le côté gauche de la zone de mélange, se retrouve coupée en trois morceaux du fait de sa grande variation en densité.

4.3.3.2 Fonction de distribution et bimodalité

Les figures 4.10(c) et 4.10(d) représentent la fonction de distribution $p(\rho' / (\rho_2 - \rho_1), z/L)$, ainsi que la courbe de séparation optimale $\rho'^{\text{lim}}(z/L) / (\rho_2 - \rho_1)$ pour les deux temps t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , les pics $\rho'^{\pm}$ ont des profils bien définis, quoique seulement sur l'intervalle $[-0, 25; 0, 25]$. Le fluide est encore essentiellement laminaire, il y a donc peu de mélange et les particules de fluide ont presque toutes la même densité ρ_1 ou ρ_2 .

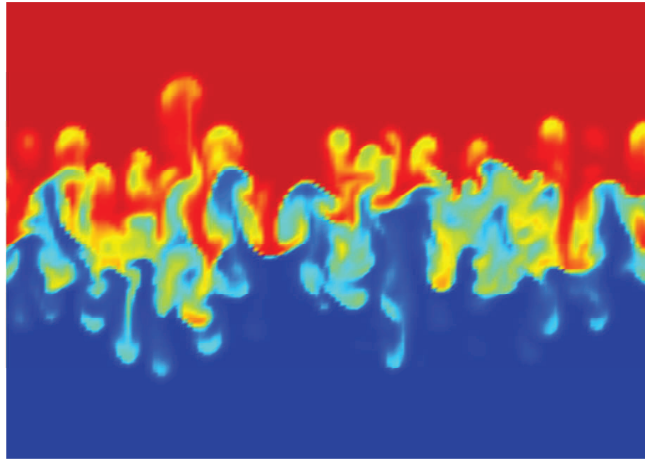
- Au temps t_2 , restent toujours les deux pics bien définis qui correspondent aux fluides laminaires purs qui entrent juste dans le mélange. Le fluide pur n'a pas encore eu le temps de beaucoup se mélanger avec l'autre fluide, la densité varie donc peu. Dans les bulles, le fluide est turbulent et a déjà traversé toute la zone de mélange, sa densité est donc plus fluctuante. La fonction de distribution est alors étalée car la gamme de valeurs de la densité est plus grande. En milieu de zone de mélange, le fluide étant complètement turbulent, comme pour la vitesse, les fluctuations de densité rendent alors impossible une quelconque apparition des deux pics $\rho'^{\pm}$ recherchés, et le champ est monomodal.

Les figures 4.11(c) et 4.11(d) représentent les profils du coefficient de bimodalité $\beta^{\rho'}$ pour les temps t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , le fluide est laminaire et donc très peu mélangé, la distribution est bien bimodale et $\beta^{\rho'}$ a une valeur très proche de celle obtenue pour une distribution bimodale dont la distribution autour de chaque mode suit une loi normale avec $\beta = 1,3$. Le résultat est meilleur qu'avec les fluctuations de vitesse.
- Au temps t_2 , le mélange est très hétérogène, la fonction de distribution a alors perdu son comportement bimodal, le coefficient $\beta^{\rho'}$ a une valeur trop grande pour parler de bimodalité.



(a)



(b)

FIG. 4.7 – Cartes en niveau de couleurs dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D du champ de densité aux temps (a) $t_1 = 2,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) lorsque le mélange est laminaire, et (b) $t_2 = 5,2$ lorsque le mélange est turbulent.

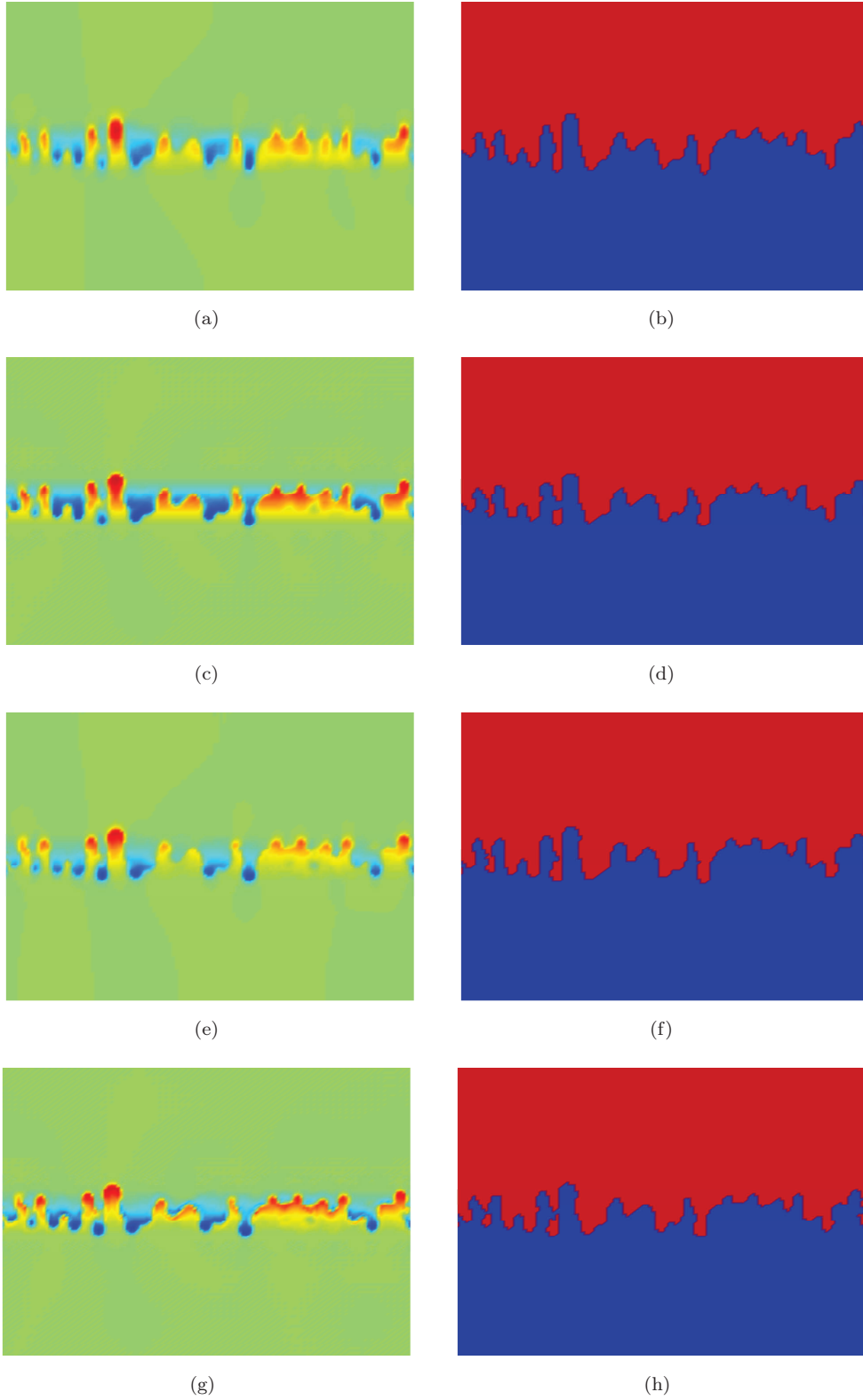


FIG. 4.8 – Cartes en niveaux de couleurs, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t_1 = 2,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), du champ utilisé pour la détection (première colonne) et du champ de structures b^+ obtenus (deuxième colonne) avec $\{(a),(b)\}$ u' , $\{(c),(d)\}$ ρ' , $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5.

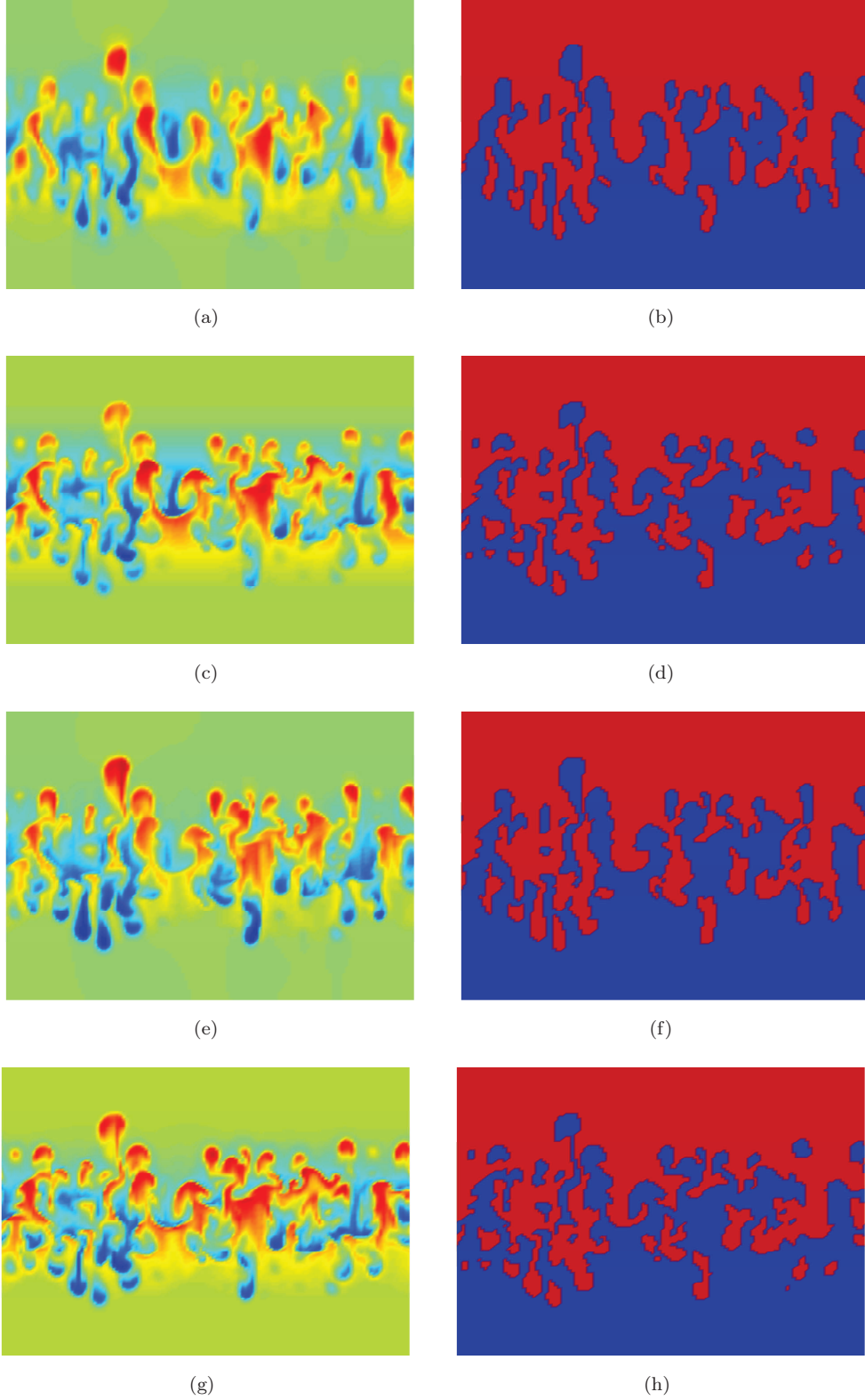


FIG. 4.9 – Cartes en niveaux de couleurs, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t_2 = 5.2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), du champ utilisé pour la détection (première colonne) et du champ de structures b^+ obtenus (deuxième colonne) avec $\{(a),(b)\}$ u' , $\{(c),(d)\}$ ρ' , $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5.

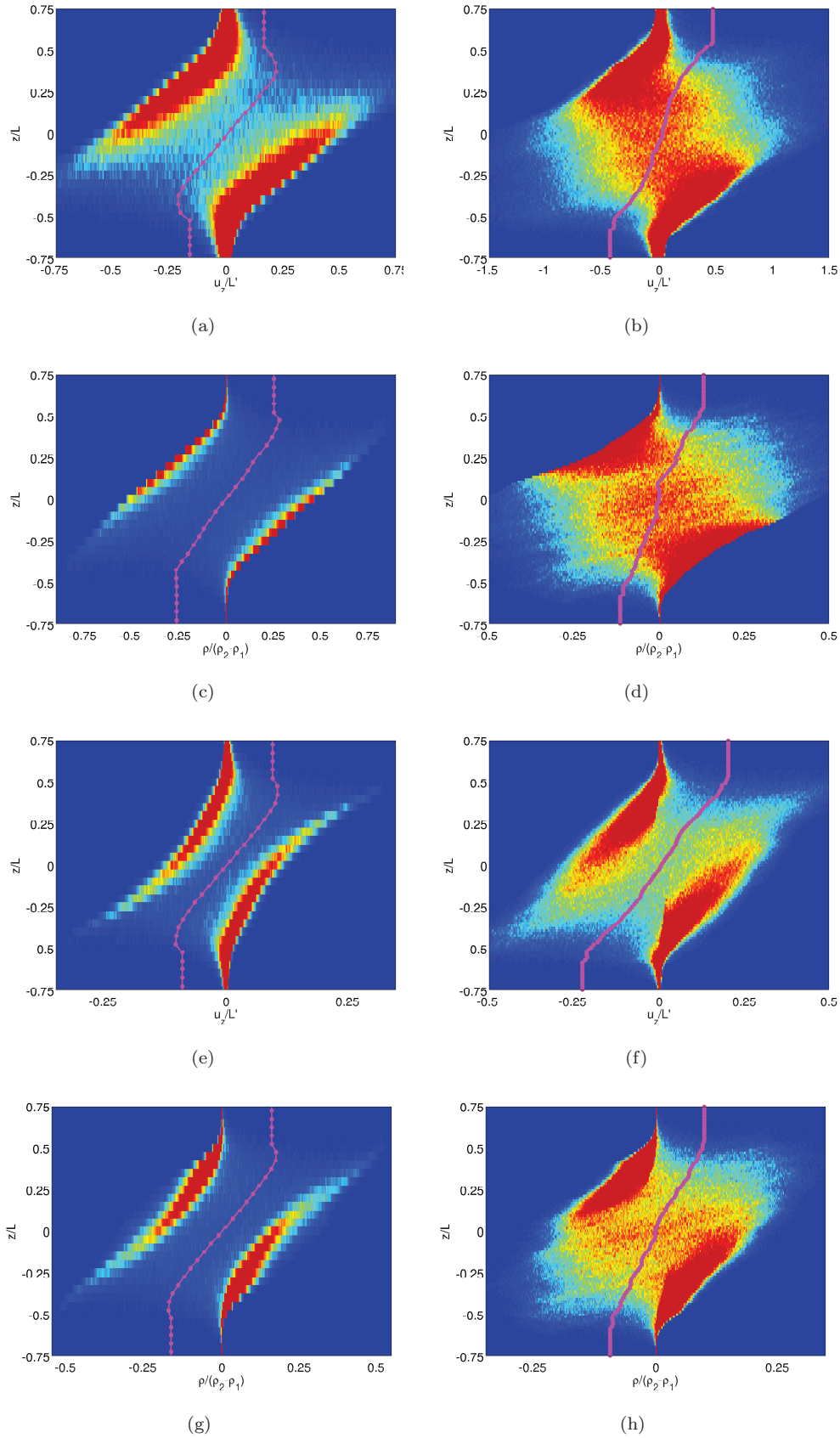


FIG. 4.10 – Fonctions de distribution suivant z/L aux temps (en unités de $\sqrt{H/g}$) $t_1 = 2,2$ (première colonne) et $t_2 = 5,2$ (deuxième colonne) de $\{(a),(b)\}$ u'/L' , $\{(c),(d)\}$ $\rho'/(\rho_2 - \rho_1)$, $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'/L'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'/(\rho_2 - \rho_1)$. En magenta les courbes des seuils associés. L'échelle de couleur des cartes est ajustée de façon à obtenir du bleu pour $p = 0$ et du rouge pour $p_{\max} = \max_{\phi_s} p(\phi_s, z = 0)$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5.

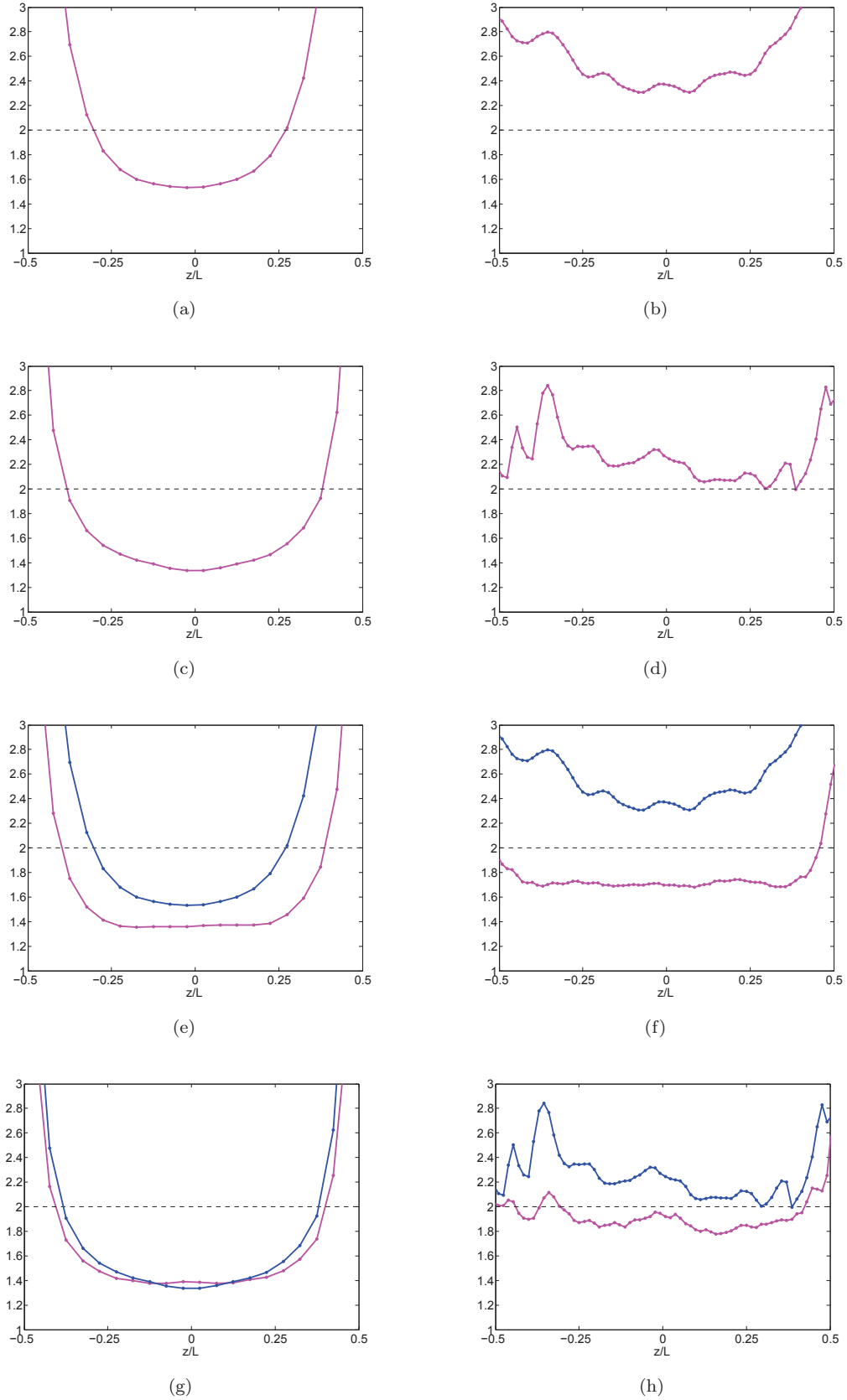


FIG. 4.11 – Profils des coefficients de bimodalité β suivant z/L aux temps (en unités de $\sqrt{H/g}$) $t_1 = 2,2$ (première colonne) et $t_2 = 5,2$ (deuxième colonne) de $\{(a),(b)\} u'/L'$, $\{(c),(d)\} \rho'/(\rho_2 - \rho_1)$, $\{(e),(f)\} \tilde{u}'/L'$, $\{(g),(h)\} \tilde{\rho}'/(\rho_2 - \rho_1)$. En pointillé, la valeur 2,0 d'une distribution sans bimodalité. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5. Rappels en bleu sur (e) à (h) des courbes respectivement en (a) à (d) pour visualiser l'effet du filtrage.

4.4 Limites de l'utilisation de champs instantanés : importance de l'effet de mémoire

4.4.1 Imperfection topologique du champ de structures

Détecter des champs de structures avec une méthode en post-traitement est une approche simple mais qui doit s'appuyer sur des champs instantanés comme les fluctuations de vitesse verticale u' ou de densité ρ' . Cela entraîne une déformation de la détection due en général à l'intermittence des valeurs des champs physiques. Mais il se produit aussi d'autres distorsions avec la vitesse verticale (zones de re-circulation et points d'arrêt) comme avec la densité (fortes hétérogénéités) comme cela a été discuté en 4.3.2.2.

4.4.2 Faible répartition statistique bimodale

Le critère numéro 7 (p.60) de notre approche de détection réside dans une séparation optimale ou suffisante de la fonction de distribution, entre Φ_s^- et Φ_s^+ . Cependant, le contraste des champs instantanés de vitesse verticale ou de densité ne le permet pas. Les fluctuations des champs dues à la turbulence entraînent un étalement et des distorsions de la fonction de distribution, les pics se confondent l'un avec l'autre lorsque la turbulence est forte au centre de la zone de mélange, et le coefficient de bimodalité a des valeurs trop élevées.

4.4.3 Conclusion

Ces exemples mettent en avant l'impact de la turbulence qui introduit des perturbations à toutes les échelles alors que la détection de structures doit se faire à grande échelle (échelle intégrale où se trouve l'essentiel de l'énergie cinétique). Ainsi, dans le cas de la vitesse verticale, même si une particule monte en moyenne dans le temps, sa vitesse fluctue et peut devenir négative en raison de la turbulence. Et dans le cas de la densité, même si la particule est dense, elle peut appartenir à une structure montante. De plus, les fluctuations et hétérogénéités s'accroissent dans les simulations à plus haute résolution. En effet, à grand nombre de mailles, la viscosité numérique est plus faible et les fluctuations turbulentes aux petites échelles s'accroissent. Nous devons donc créer un effet de mémoire permettant de ne récupérer qu'une information moyenne, par exemple dans le temps, associée au champ séparateur étudié. Il est donc naturel d'envisager une forme de filtrage des petites échelles sur diverses grandeurs physiques afin d'éliminer, dans le cas de la vitesse verticale, les effets de re-circulation et de points d'arrêt, et dans le cas de la densité, les hétérogénéités dues au mélange imparfait des fluides.

4.5 Méthodes intrusives : filtrage temporel

Comme énoncé en introduction, de nombreuses méthodes de suivi des structures ont été élaborées. Parmi toutes ces méthodes, le filtrage temporel s'est avéré être la plus efficace. Les autres méthodes sont présentées en annexe B.

Le champ instantané ne permettant pas de faire une bonne détection de structures, cela motive l'introduction d'une méthode de filtrage des échelles inférieures à l'échelle intégrale. Pour cela, nous avons opté pour un filtrage temporel Lagrangien des champs physiques du mélange. Ainsi le filtrage va éliminer l'essentiel des fluctuations dont l'échelle de temps est petite et qui ne participent pas à l'évolution globale des structures du système.

Nous proposons l'équation suivante qui filtre dans le temps le champ étudié Φ pour une durée liée à la fréquence des fluctuations locales :

$$\partial_t \tilde{\Phi} + u_i \partial_i \tilde{\Phi} = \underbrace{C_\Phi \tilde{\omega} (\Phi - \tilde{\Phi})}_{\text{terme de filtrage}} \quad (4.19)$$

où :

- $\tilde{\Phi}(t, x, y, z)$ est le champ physique filtré du champ local Φ ,
- $u_i(t, x, y, z)$ est le champ des vitesses locales,
- $\tilde{\omega}(t, x, y, z) = \tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$ est le champ local filtré de la relaxation de la turbulence,
- $\tilde{k}(t, x, y, z)$ est l'énergie cinétique turbulente filtrée locale,
- $\tilde{\varepsilon}(t, x, y, z) = 2\nu \widetilde{S_{ij}S_{ij}}$, avec $S_{ij} = (\partial_i u_j + \partial_j u_i)/2$, est la dissipation de l'énergie cinétique turbulente filtrée locale,
- et C_Φ est un coefficient d'ajustement.

Le fait que $\tilde{\omega}$ dépende des champs filtrés $\tilde{k}$ et $\tilde{\varepsilon}$ qui dépendent eux-mêmes de $\tilde{\omega}$ crée un système auto-asservi. Ainsi, le taux de relaxation filtré s'adapte à l'échelle des fluctuations restantes dans les champs filtrés. Cet auto-asservissement assure une élimination efficace des fluctuations des champs instantanés.

On notera que, dans ce cas, le filtrage spatial ne permet pas une bonne attribution des fluides aux structures dans les zones de recirculation et les points d'arrêt. En effet, ces phénomènes requièrent un suivi dans le temps de l'écoulement, ce qui justifie le choix du filtrage temporel. Il est de plus intéressant d'ajouter que le filtrage temporel est une opération locale en espace qui est donc numériquement moins complexe et plus résolu que le filtrage spatial, nécessairement non local.

Il faut donc filtrer le champ séparateur ϕ_s , soit les fluctuations de vitesse $u' = u_z - \overline{u_z}$ ou les fluctuations de densité $\rho' = \rho - \overline{\rho}$, mais aussi l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε afin de déterminer $\tilde{\omega}$. Pour produire $b^\pm$, le seuillage $\widehat{\phi_s}^{\text{lim}}$ sera choisi de façon à maximiser respectivement le terme $M_2^s(\tilde{u}')$ ou $M_2^s(\tilde{\rho}')$.

Les coefficients C_Φ doivent être ajustés. Dans la zone de mélange, la turbulence est globalement plus intense au milieu qu'aux bords, et il faudra un temps plus long pour filtrer leurs fluctuations. Nous modulons donc C_Φ suivant un profil parabolique de façon à avoir un taux de relaxation plus faible, et donc un temps de filtrage plus long, au milieu qu'aux bords de la zone de mélange :

$$C_\Phi = \begin{pmatrix} C_\phi \\ C_k \\ C_\varepsilon \end{pmatrix} (1 + A\xi^2) \quad \text{pour } |\xi| \leq 0,5, \quad (4.20a)$$

où $\xi = z/L$ est la coordonnée réduite. En dehors de la zone de mélange, C_Φ garde la valeur trouvée en $\xi = \pm 1/2$, soit

$$C_\Phi = \begin{pmatrix} C_\phi \\ C_k \\ C_\varepsilon \end{pmatrix} (1 + A\xi^2) \quad \text{pour } |\xi| > 0,5, \quad (4.20b)$$

Ces paramètres doivent être maintenant quantifiés. Ils sont choisis de façon à obtenir la meilleure bimodalité possible de la distribution du champ séparateur filtré $\widetilde{\phi}_s$ en $z = 0$.

4.5.1 Optimisation du filtrage temporel

Nous voulons avoir la meilleure distribution bimodale possible. Cela est obtenu par l'optimisation du coefficient de bimodalité β^ϕ du champ séparateur filtré $\widetilde{\phi}_s$. Cette optimisation est faite au centre de la zone de mélange, soit $z = 0$, car c'est là que la turbulence est la plus forte et donc la plus difficile à filtrer.

Une méthode d'optimisation par calcul de sensibilité est utilisée. Par définition, la sensibilité $S_a^{\beta^\phi}$ de β^ϕ par rapport à un paramètre a représente la variation au premier ordre de β^ϕ générée par la perturbation du paramètre a :

$$S_a^{\beta^\phi} = \frac{\partial \beta^\phi}{\partial a}. \quad (4.21)$$

β^ϕ est choisi comme fonction coût. Afin de minimiser cette fonction, il convient de trouver les valeurs des paramètres influents a_i telles que :

$$S_{a_i}^{\beta^\phi} = 0, \quad (4.22)$$

où les a_i sont les composantes du vecteur des paramètres influents a .

Développons $S_a^{\beta^\phi}$:

$$\begin{aligned} S_a^{\beta^\phi} &= \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{M_4 M_2 - M_3^2}{M_2^3} \right), \\ &= \frac{(S_a^{M_4} M_2 + M_4 S_a^{M_2} - 2 S_a^{M_3} M_3) M_2^3 - 3 S_a^{M_2} M_2^2 (M_4 M_2 - M_3^2)}{M_2^6}, \\ &= \frac{1}{M_2^2} S_a^{M_4} - 2 \frac{M_3}{M_2^3} S_a^{M_3} + \frac{3 M_3^2 - 2 M_2 M_4}{M_2^4} S_a^{M_2}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Par définition, $\forall n \in [2, 3, 4]$:

$$M_n = \overline{(\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^n}. \quad (4.24)$$

Donc, $S_a^{M_n} \forall n \in [2, 3, 4]$ peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} S_a^{M_n} &= \frac{\partial}{\partial a} \overline{(\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^n}, \\ &= \frac{\partial}{\partial a} \int_x \int_y (\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^n dx dy, \\ &= \int_x \int_y \frac{\partial}{\partial a} (\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^n dx dy, \\ &= \int_x \int_y n (\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^{n-1} (S_a^{\widetilde{\phi}_s} - \overline{S_a^{\widetilde{\phi}_s}}) dx dy, \\ &= \int_x \int_y n (\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^{n-1} (S_a^{\widetilde{\phi}_s} - \overline{S_a^{\widetilde{\phi}_s}}) dx dy, \\ S_a^{M_n} &= n \overline{(\widetilde{\phi}_s - \widetilde{\phi}_s)^{n-1} (S_a^{\widetilde{\phi}_s} - \overline{S_a^{\widetilde{\phi}_s}})}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Pour connaître les sensibilités $S_a^{M_n}$ et donc les sensibilités $S_a^{\beta^\phi}$, il faut calculer les sensibilités $S_a^{\widetilde{\phi}_s}$. Pour cela nous devons résoudre l'équation de sensibilité du filtrage temporel. Celle-ci se trouve en

dérivant l'équation 4.19 par rapport à a :

$$\frac{\partial}{\partial a} \left(\partial_t \tilde{\Phi} + u_i \partial_i \tilde{\Phi} = C_{\Phi} \tilde{\omega} (\Phi - \tilde{\Phi}) \right), \quad (4.26)$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} \partial_t S_a^{\tilde{\Phi}} + u_i \partial_i S_a^{\tilde{\Phi}} = & \quad \tilde{\omega} S_a^{C_{\Phi} \otimes} (\Phi - \tilde{\Phi}) \\ & + (C_{\Phi}^t S_a^{\tilde{\omega}}) \otimes (\Phi - \tilde{\Phi}) \\ & - \tilde{\omega} C_{\Phi} \otimes S_a^{\tilde{\Phi}}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

où $\otimes$ est le produit tensoriel à l'ordre 2 contracté une fois. Pour calculer la sensibilité $S_a^{\tilde{\omega}}$, il faut donc aussi calculer $S_a^{\tilde{\omega}}$, soit $S_a^{\tilde{k}}$ et $S_a^{\tilde{\varepsilon}}$.

Les paramètres ayant un effet sur le filtrage de ϕ_s sont ceux qui permettent d'ajuster C_{Φ} . Le vecteur paramètre a est donc :

$$a = \begin{pmatrix} C_{\phi} \\ C_k \\ C_{\varepsilon} \\ A \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

Le vecteur Φ des champs physiques locaux à filtrer est :

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_s \\ k \\ \varepsilon \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Les autres termes de l'équation 4.27 sont alors obtenus :

$$C_{\Phi} = \begin{pmatrix} C_{\phi} \\ C_k \\ C_{\varepsilon} \end{pmatrix} (1 + A\xi^2) \quad ; \quad S_a^{C_{\Phi}} = \begin{pmatrix} 1 + A\xi^2 & 0 & 0 & C_{\phi}\xi^2 \\ 0 & 1 + A\xi^2 & 0 & C_k\xi^2 \\ 0 & 0 & 1 + A\xi^2 & C_{\varepsilon}\xi^2 \end{pmatrix} \quad ; \quad (4.30a)$$

$$S_a^{\tilde{\Phi}} = \begin{pmatrix} S_{C_{\phi}}^{\tilde{\phi}_s} & S_{C_k}^{\tilde{\phi}_s} & S_{C_{\varepsilon}}^{\tilde{\phi}_s} & S_A^{\tilde{\phi}_s} \\ 0 & S_{C_k}^{\tilde{k}} & S_{C_{\varepsilon}}^{\tilde{k}} & S_A^{\tilde{k}} \\ 0 & S_{C_k}^{\tilde{\varepsilon}} & S_{C_{\varepsilon}}^{\tilde{\varepsilon}} & S_A^{\tilde{\varepsilon}} \end{pmatrix} \quad ; \quad S_{\tilde{\Phi}}^{\tilde{\omega}} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}} & \frac{1}{\tilde{k}} \end{pmatrix} \quad ; \quad (4.30b)$$

$$\text{et } {}^t S_a^{\tilde{\omega}} = {}^t S_a^{\tilde{\Phi}} {}^t S_{\tilde{\Phi}}^{\tilde{\omega}} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}} S_{C_k}^{\tilde{k}} + \frac{1}{\tilde{k}} S_{C_k}^{\tilde{\varepsilon}} \\ -\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}} S_{C_{\varepsilon}}^{\tilde{k}} + \frac{1}{\tilde{k}} S_{C_{\varepsilon}}^{\tilde{\varepsilon}} \\ -\frac{\tilde{\omega}}{\tilde{k}} S_A^{\tilde{k}} + \frac{1}{\tilde{k}} S_A^{\tilde{\varepsilon}} \end{pmatrix}. \quad (4.30c)$$

Ainsi pour optimiser le coefficient de bimodalité en $z = 0$ au premier ordre, il faut trouver les valeurs de C_{Φ} , C_k , C_{ε} et A telles que $S_{C_{\Phi}}^{\beta^{\phi}}$, $S_{C_k}^{\beta^{\phi}}$, $S_{C_{\varepsilon}}^{\beta^{\phi}}$ et $S_A^{\beta^{\phi}}$ soient les plus proches possible de 0 en $z = 0$.

Nous avons désormais une méthode statistique qui permet d'obtenir le meilleur filtrage possible selon nos critères.

4.5.2 Résumé de l'approche

En résumé, les méthodes intrusives de détection présentées ici sont basées sur l'algorithme de calcul suivant :

1. Première partie : optimisation du vecteur coefficient C_Φ pour une bimodalité optimale :
 - 1.1 lancer une simulation numérique avec un certain vecteur coefficient C_Φ pour le filtrage.
 - 1.2 calculer les champs filtrés $\tilde{\phi}_s$, $\tilde{k}$ et $\tilde{\varepsilon}$ suivant l'équation :

$$\partial_t \tilde{\Phi} + u_i \partial_i \tilde{\Phi} = C_\Phi \tilde{\omega} (\Phi - \tilde{\Phi}). \quad (4.31)$$

- 1.3 calculer les sensibilités $S_a^{\tilde{\Phi}}$, avec $a = (C_\phi, C_k, C_\varepsilon, A)$, suivant l'équation :

$$\begin{aligned} \partial_t S_a^{\tilde{\Phi}} + u_i \partial_i S_a^{\tilde{\Phi}} = & \tilde{\omega} S_a^{C_\Phi \otimes} (\Phi - \tilde{\Phi}) \\ & + (C_\Phi^t S_a^{\tilde{\omega}}) \otimes (\Phi - \tilde{\Phi}) \\ & - \tilde{\omega} C_\Phi \otimes S_a^{\tilde{\Phi}}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

- 1.4 calculer les sensibilités $S_a^{\beta^\phi}$ du coefficient de bimodalité par rapport au vecteur des paramètres a en $z = 0$ suivant l'équation :

$$S_a^{\beta^\phi} = \frac{1}{M_2^2} S_a^{M_4} - 2 \frac{M_3}{M_2^3} S_a^{M_3} + \frac{3M_3^2 - 2M_2 M_4}{M_2^4} S_a^{M_2}, \quad (4.33)$$

avec :

$$S_a^{M_n} = n \overline{(\tilde{\phi}_s - \overline{\tilde{\phi}_s})^{n-1} (S_a^{\tilde{\phi}_s} - \overline{S_a^{\tilde{\phi}_s}})}. \quad (4.34)$$

- 1.5 analyser les valeurs des sensibilités et ajuster les composantes a_i du vecteur paramètre a de façon à faire diminuer le coefficient de bimodalité, soit :
 - on augmente a_i si $S_{a_i}^{\beta^\phi} < 0$,
 - on diminue a_i si $S_{a_i}^{\beta^\phi} > 0$.
- 1.6 ré-itérer la procédure pour obtenir des sensibilités nulles du coefficient de bimodalité par rapport à a , soit $S_{a_i}^{\beta^\phi} = 0$.
2. Deuxième partie : détection de structures avec les paramètres a_i optimaux :
 - 2.1 faire une simulation avec les paramètres a_i permettant un filtrage optimal.
 - 2.2 calculer, pour toute valeur de $\tilde{\phi}_s^{\text{opt}}$, les champs de structures $b^\pm(\tilde{\phi}_s^{\text{opt}})$ selon :

$$b^+(t, x, y, z, \tilde{\phi}_s^{\text{opt}}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{\phi}_s(t, x, y, z) > \tilde{\phi}_s^{\text{opt}}(z) \\ 0 & \text{si } \tilde{\phi}_s(t, x, y, z) < \tilde{\phi}_s^{\text{opt}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+, \quad (4.35)$$

et calculer pour chaque champ de structures $b^\pm(\tilde{\phi}_s^{\text{opt}})$, la contribution statistique $M_2^s(z, \tilde{\phi}_s^{\text{opt}})$ selon :

$$M_2^s(z, \tilde{\phi}_s^{\text{opt}}) = \overline{H^+} \overline{H^-} \left(\frac{\overline{H^+ X}}{\overline{H^+}} - \frac{\overline{H^- X}}{\overline{H^-}} \right)^2 \quad (4.36)$$

- 2.3 récupérer la courbe de limite optimale $\tilde{\phi}_s^{\text{lim}}(t, z) = \max_{\tilde{\phi}_s^{\text{opt}}} M_2^s$,
- 2.4 calculer les champs de structures optimaux $b^\pm$.

4.5.3 Détection avec $\tilde{\phi}_s = \tilde{u}'$

La détection de structures en prenant le champ filtré des fluctuations de la vitesse verticale comme champ séparateur $\tilde{\phi}_s = \tilde{u}'$ respecte les conditions :

$$u' = u_z - \overline{u_z} \quad (4.37)$$

$$b^+(t, x, y, z, \tilde{u}'^{\text{lim}}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{u}'(t, x, y, z) < \tilde{u}'^{\text{lim}}(z) \\ 0 & \text{si } \tilde{u}'(t, x, y, z) > \tilde{u}'^{\text{lim}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+, \quad (4.38)$$

4.5.3.1 Profils des paramètres à bimodalité $\beta^{u'}$ optimale

La première partie de la méthode de détection avec filtrage permet de trouver les valeurs de C_ϕ , C_k , C_ε et A qui donnent le meilleur profil de bimodalité de la fonction de distribution de $\tilde{u}'$. Nous avons obtenu $C_\phi = 0,50$, $C_k = 1,75$, $C_\varepsilon = 0,75$ et $A = 4$. La figure 4.12 expose les profils de C_ϕ correspondant à ces valeurs.

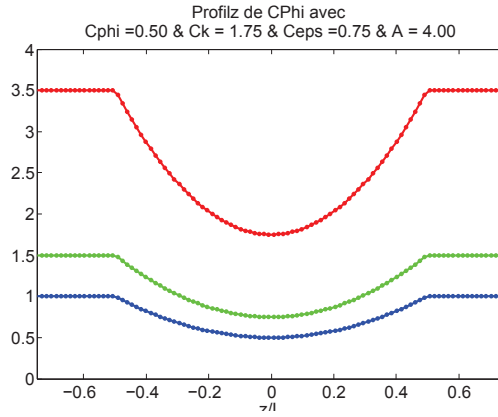


FIG. 4.12 – Profils des coefficients d’ajustement optimaux C_ϕ des fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$ suivant z/L . Le profil parabolique dans la zone de mélange permet de prendre en compte la variation d’intensité de la turbulence entre les bords et le milieu de la zone de mélange.

Ainsi, il faut attribuer à la dissipation un « temps de mémoire » deux fois supérieur à celui de l’énergie cinétique turbulente. Cela peut s’expliquer par le fait que la dissipation de l’énergie cinétique turbulente est liée aux variations de vitesse et est donc directement liée aux fluctuations de vitesse physiques mais aussi numériques en raison du terme différentiel. Le champ u' nécessite aussi un temps de filtrage plus long. $A = 4$ produit des temps de filtrage deux fois plus longs au milieu de la zone de mélange qu’en bordure.

4.5.3.2 Topologie du champ de structures

Les figures 4.8(e), 4.8(f), 4.9(e) et 4.9(f) montrent les cartes des fluctuations de la vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, et de la fonction indicatrice de structures b^+ pour les temps t_1 et t_2 .

Grâce à l’effet de mémoire, la vitesse est plus homogène dans chacune des bulles montantes et descendantes, redéfinissant ainsi les structures de manière plus pertinente : les zones de re-circulation et les points d’arrêt sont désormais bien capturées. La forme du nouveau champ de structures b^+ est également mieux corrélée avec la forme du champ de densité en bord de zone de mélange. Ainsi, grâce au filtrage temporel, certaines zones de fluide sont passées d’une structure – sur la figure 4.9(b) à une structure + sur la figure 4.9(f), comme par exemple la bulle bleue descendante de fluide léger située en bas à gauche de la zone de mélange.

4.5.3.3 Fonction de distribution

Les figures 5.2(e) et 4.10(f) représentent les fonctions de distribution $p(\tilde{u}'/L', z/L)$, ainsi que la courbe de séparation optimale $\tilde{u}'^{\text{lim}}(z/L)/L'$ pour les deux instants t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , le filtrage a annulé les fluctuations dues aux termes faiblement non-linéaires, les profils de pics sont donc mieux séparés que sur la figure 4.10(a), et surtout sont définis tout le long de la zone de mélange. Le filtrage a un impact non-négligeable dès le début de la simulation.
- Au temps t_2 , le filtrage a permis de mieux regrouper les valeurs de vitesse autour des pics $\tilde{U}'^{\pm}$, améliorant ainsi la bimodalité de la fonction de distribution. Le profil de pic ne reste cependant pas parfaitement défini tout le long de la zone de mélange. Pour obtenir cela, il faudrait un grand temps de filtrage et l'information utile à la détection de l'interface entre les champs de structures serait alors perdue. La minimisation du coefficient de bimodalité permet de trouver le meilleur compromis.

Les figures 4.11(e) et 5.2(f) représentent les profils du coefficient de bimodalité $\beta^{\tilde{u}'}$ et $\beta^{u'}$ pour les temps t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , la bimodalité est bien meilleure que pour le champ instantané et a été bien aplatie tout au long de la zone de mélange; $\beta^{\tilde{u}'}$ a une valeur proche de 1,3, soit une loi bimodale normale.
- Au temps t_2 , la turbulence est installée mais le filtrage a considérablement réduit les fluctuations de la vitesse aux petites échelles, permettant d'obtenir un coefficient $\beta^{u'}$ dont la valeur reste en dessous de 2,0 et cela tout le long de la zone de mélange. Contrairement à la distribution du champ instantané, la distribution du champ filtré reste bimodale.

4.5.4 Détection avec $\tilde{\phi}_s = \tilde{\rho}'$

La détection de structures en prenant le champ des fluctuations de densité filtrées comme champ séparateur $\tilde{\phi}_s = \tilde{\rho}'$ suit les conditions :

$$\rho' = \rho - \bar{\rho}, \quad (4.39)$$

$$b^+(t, x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{\rho}'(t, x, y, z) < \tilde{\rho}'^{\text{lim}}(z) \\ 0 & \text{si } \tilde{\rho}'(t, x, y, z) > \tilde{\rho}'^{\text{lim}}(z) \end{cases} \quad \text{et } b^- = 1 - b^+. \quad (4.40)$$

4.5.4.1 Profils des paramètres optimisés pour une bimodalité $\beta^{\rho'}$ optimale

Pour le filtrage de ρ' , les valeurs $C_\phi = 1,50$, $C_k = 1,50$, $C_\epsilon = 1,00$ et $A = 4$ donnent la meilleure bimodalité. La figure 4.13 expose les profils de C_ϕ correspondant.

Ainsi, dans le cas de la densité, il faut aussi donner plus de temps de filtrage pour la dissipation que pour l'énergie cinétique. Un temps de filtrage plus court est par contre nécessaire pour la densité. $A = 4$ donne encore un temps de filtrage deux fois plus long au milieu de la zone de mélange qu'en bordure.

4.5.4.2 Topologie du champ de structures

Les figures 4.8(g), 4.8(h), 4.9(g) et 4.9(h) montrent les cartes des fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et de la fonction indicatrice de structures b^+ construite avec $\tilde{\rho}'$ aux temps t_1 et t_2 .

Grâce à l'effet de mémoire de l'équation, la densité est plus homogène dans chacune des bulles montantes et descendantes. La forme du nouveau champ de structures b^+ n'est cependant que légèrement mieux corrélée avec la forme du champ de densité. Ainsi, grâce au filtrage temporel, certaines petites zones de fluide sont passées d'une structure $\mp$ sur la figure 4.9(d) à une structure $\pm$ sur la figure 4.9(h), comme par exemple la bulle bleue descendante de fluide léger située en bas à gauche

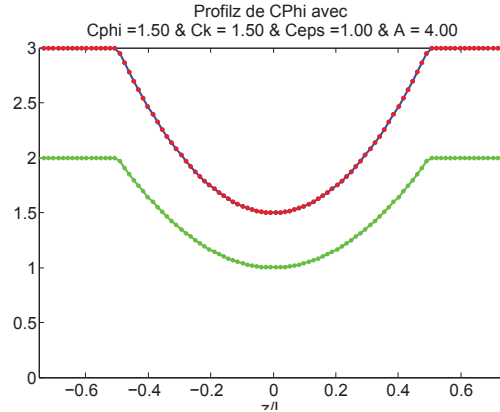


FIG. 4.13 – Profils des coefficients d’ajustement optimaux C_Φ des fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$ suivant z/L . Du fait du comportement différent de la densité ρ par rapport aux fluctuations de vitesse verticale u' , les valeurs des coefficients sont différents, donnant ainsi des profils C_Φ différents que ceux exposés sur la figure 4.12.

de la zone de mélange. Cependant, le filtrage de la densité n’a que très légèrement modifié le champ de structures et celui-ci reste trop corrélé au champ de densité et pas assez au champ de vitesse. Il subsiste alors certaines attributions erronées de fluide aux champs de structures $\pm$. Nous savons d’ores et déjà que le filtrage de la densité n’aura donc qu’un très faible impact sur les profils de corrélations statistiques.

4.5.4.3 Fonction de distribution

Les figures 4.10(g) et 4.10(h) représentent la fonction de distribution $p(\tilde{\rho}'/(\rho_2 - \rho_1), z/L)$, ainsi que la courbe de séparation optimale $(\tilde{\rho}')^{\text{lim}}(z/L)/(\rho_2 - \rho_1)$ pour les deux instants t_1 et t_2 .

- Au temps t_1 , le filtrage a annulé les quelques fluctuations présentes dues à la faible turbulence, et les profils de pics sont donc mieux séparés sur une plus grande partie de la zone de mélange qu’avec le champ instantané ρ' .
- Au temps t_2 , l’impact du filtrage se voit plus. Il a permis de mieux mélanger les deux fluides et donc de regrouper les valeurs de densité autour des pics $\tilde{\rho}'^\pm$, améliorant ainsi la bimodalité de la fonction de distribution. La fonction de distribution ne permet cependant pas d’obtenir une réelle bimodalité car on ne peut voir qu’un seul maximum au centre de la zone de mélange. Ainsi, même avec le champ filtré, la bimodalité de la fonction de distribution n’est pas assez forte.

Les figures 4.11(g) et 4.11(h) représentent les profils du coefficient de bimodalité $\beta^{\tilde{\rho}'}$ et $\beta^{\rho'}$ pour les temps t_1 et t_2 . Les profils sont améliorés.

- Au temps t_1 , le profil de $\beta^{\tilde{\rho}'}$ est plus plat que celui de $\beta^{\rho'}$, la valeur au centre est cependant plus élevée. En effet, bien que le champ instantané de densité soit presque entièrement pur, le filtrage opère un lissage et vient créer des valeurs intermédiaires créant ainsi un élargissement autour des pics $\tilde{\rho}'^\pm$.
- Au temps t_2 , la turbulence est installée mais le filtrage a minimisé un peu l’hétérogénéité de la densité et donc minimisé la bimodalité. L’amélioration reste cependant faible et $\beta^{\rho'}$ reste trop proche de la valeur 2,0 d’une distribution uniforme au centre de la zone de mélange. Ainsi, le filtrage n’apportera a priori pas de grandes modifications des résultats statistiques par rapport à ceux obtenus avec le champ instantané.

4.6 Profils de variables conditionnées par les structures et premières comparaisons avec le modèle 2SFK

Comme cela sera exposé en détail dans le chapitre suivant, le modèle de turbulence 2SFK a été développé par fermeture des équations moyennes conditionnées par la présence des structures. Il permet ainsi de décrire le comportement des diverses grandeurs moyennes caractéristiques par champ de structures.

Ces grandeurs sont obtenues dans le modèle avec une moyenne de Favre d'ensemble. Ici, l'homogénéité de l'écoulement dans les directions x et y permet de substituer cette moyenne d'ensemble par la moyenne d'espace sur chaque section à z donné.

$$\tilde{\phi}^{\pm}(z) = \frac{\overline{b^{\pm} \rho \phi}^{xy}}{\overline{b^{\pm} \rho}^{xy}} \quad (4.41)$$

Les corrélations statistiques représentent l'information principale obtenue avec le modèle 2SFK. Une première comparaison de ces corrélations avec celles obtenues par les différentes méthodes de détection permet alors de choisir la méthode la plus efficace.

En plus des résultats sur la topologie et la fonction de distribution, nous examinons pour chaque méthode les profils de

- fractions volumiques du fluide lourd $\overline{\alpha_2}$, et de la structure $+ \overline{b^+}$,
- densités $\overline{\rho}$ et $\rho^{\pm}$,
- vitesses verticales $U_z = \overline{\rho u_z} / \overline{\rho}$ et $U_z^{\pm}$,
- différents termes d'énergie caractéristiques du mélange,
- et enfin des termes de travail de la traînée et de production d'énergie cinétique turbulente (dit enthalpique ou de Rayleigh–Taylor).

4.6.1 Fraction volumique

La figure 4.14 représente les profils des fractions volumiques de b^+ et du fluide lourd 2 obtenus par le modèle 2SFK ainsi que les diverses méthodes de détection.

Toutes les méthodes de détection donnent qualitativement des profils équivalents à la prédiction du modèle 2SFK. Cependant, quelques différences subsistent. Les méthodes de filtrage temporel réduisent le bruit observé avec les champs instantanés. L'utilisation de la densité, instantanée comme filtrée, donne un profil très aplati au milieu de la zone de mélange, mettant en avant une mauvaise attribution du fluide aux structures $\pm$ en raison de la présence d'hétérogénéités trop grandes. Les méthodes en vitesse donnent une meilleure approximation que celles en densité.

Utiliser la vitesse verticale, instantanée comme filtrée, semble donc la meilleure solution pour la fraction volumique des structures.

4.6.2 Densité

La figure 4.15 représente les profils des densités mono-fluide et bi-structure.

Les profils $\rho^{\pm}$ trouvés avec le champ de vitesse instantanée ont des valeurs, en bordure de zone de mélange, très proches de la densité des fluides purs, mettant en lumière le défaut, déjà identifié plus haut, de l'introduction de fluide laminaire dans les structures turbulentes à cause de la présence de points d'arrêt. Le profil obtenu avec la méthode de filtrage en vitesse donne la même tendance que la prédiction du modèle 2SFK avec un contraste de densité non-nul en bordure de zone de mélange. Les deux méthodes utilisant la densité donnent de bons résultats. En effet, les structures étant déterminées avec la densité, leurs formes en bordure de zone de mélange suivent bien le fluide mélangé, et la densité ne retombe donc pas aux valeurs des fluides purs.

L'utilisation de la densité, instantanée comme filtrée, s'avère donc être le meilleur choix pour les densités des structures.

4.6.3 Vitesse

La figure 4.16 représente les profils de vitesse verticale de Favre mono-fluide et bi-structure.

Le problème de fluide laminaire inclus dans les structures turbulentes entraîne une diminution des vitesses $U_z^\pm$ en bordure de zone de mélange lorsque l'on utilise la vitesse verticale instantanée pour la détection. De plus, cette méthode donne une vitesse bi-structure deux fois supérieure à celle du modèle. La méthode de filtrage de la vitesse résout ces problèmes et donne des profils avec une tendance équivalente à celle prédite par le modèle 2SFK et une vitesse maximale plus proche de celle du modèle. Les deux méthodes utilisant la densité donnent de bons profils de vitesse verticale. Les deux méthodes de filtrage semblent lisser et arrondir les profils traduisant un certain nombre de ré-attributions du fluide aux structures $\pm$.

L'utilisation du filtrage semble donc être la meilleure solution.

4.6.4 Termes d'énergie

La figure 4.17 représente les profils d'énergie cinétique

- turbulente mono-fluide $\overline{\rho \mathbf{u}''^2}/2/\bar{\rho}$,
- dirigée $K_d = B^+ B^- \delta \mathbf{U}^2/2$, avec $B^\pm = \bar{b}^\pm \bar{\rho}/\bar{\rho}$,
- turbulente bi-structure totale $k_b = (\bar{b}^+ \rho(\mathbf{u}^+)^2/2 + \bar{b}^- \rho(\mathbf{u}^-)^2/2)/\bar{\rho}$, et
- turbulente bi-structure massique $k^\pm = \bar{b}^\pm \rho(\mathbf{u}^\pm)^2/2/\bar{b}^\pm \bar{\rho}$.

Toutes les méthodes utilisées donnent les mêmes tendances des termes d'énergies qui s'avèrent équivalentes à celles obtenues par le modèle 2SFK. Pour toutes les méthodes, les profils $k^\pm$ retournent à la valeur nulle du fluide laminaire. On peut noter cependant une légère amélioration avec le filtrage de la vitesse verticale.

Comme déjà mentionné, l'énergie dirigée est une quantité importante pour le modèle 2SFK. Nous avons aussi vu qu'elle est maximisée lorsque nous utilisons la vitesse verticale, ce que montre la figure 4.17. Le filtrage a peu d'effet sur la valeur maximale de l'énergie dirigée, mais en revanche l'emploi de la densité pour la détection donne une énergie dirigée plus faible.

Utiliser la vitesse verticale, instantanée comme filtrée, s'avère donc la meilleure solution.

4.6.5 Termes de travail de la traînée et de Rayleigh-Taylor

La figure 4.18 représente

- le travail de la traînée dû à la dérive entre les structures $\pm$ $\Pi = \Pi^{d+} + \Pi^{d-}$,
- le travail dû aux échanges inter-structures de masse et de quantité de mouvement $\Psi^k = -\Psi^{k+} + \Psi^{k-}$, et
- la production enthalpique ou de Rayleigh-Taylor intra-structures $\text{RT} = (\phi_i^{\alpha+} + \phi_i^{\alpha-})P_{,i}$.

Tous ces termes seront détaillés dans le chapitre 5.

Le travail Ψ^k dû aux échanges d'énergie est nul avec la vitesse instantanée et maximal avec la vitesse filtrée. En utilisant la densité instantanée ou filtrée, on obtient la même quantité de travail Ψ^k qui est légèrement inférieure à celle trouvée avec la vitesse filtrée. Le terme de Rayleigh-Taylor est considéré comme délicat à modéliser. Nous voulons donc obtenir un rapport Π/RT le plus grand possible. Pour la détection avec la vitesse verticale, le filtrage augmente sensiblement la valeur de Π et améliore ainsi le rapport Π/RT . La densité instantanée donne aussi de bons résultats alors que le filtrage de la densité tend à diminuer légèrement ce rapport.

Le filtrage de la vitesse verticale donne donc les meilleurs profils. L'utilisation de la densité instantanée n'est cependant pas mauvaise non plus.

4.6.6 Conclusion

Nous avons étudié l'impact des méthodes de détection sur les corrélations statistiques qui sont les plus importantes. L'étude a montré que :

- $\tilde{u}'$ et ρ' donnent les meilleures topologies de structures,
- $\tilde{u}'$ donne la meilleure fonction de distribution,
- u' et $\tilde{u}'$ donnent les meilleurs profils $\alpha^\pm$,
- ρ' et $\tilde{\rho}'$ donnent les meilleurs profils $\rho^\pm$,
- $\tilde{\rho}'$ et $\tilde{u}'$ donnent les meilleurs profils $U_z^\pm$,
- u' et $\tilde{u}'$ donnent la plus grande énergie K_d ,
- ρ' et $\tilde{u}'$ donnent le plus grand rapport Π/RT .

Au vu de ces résultats, il apparaît que le filtrage des fluctuations de la vitesse verticale u' produit globalement les résultats les plus cohérents sur l'ensemble des champs et corrélations examinés. La grande similitude entre les résultats de vitesse filtrée et de densité instantanée est qualitativement explicable par le fait que l'équation d'évolution de ρ (l'équation de conservation de la masse) est une forme de filtrage temporel du champ de vitesse. Les différences existantes peuvent, quant à elles, s'expliquer par les termes source qui alimentent les contrastes de ces deux grandeurs. Pour la vitesse, la source est le champ de gravité qui agit sur chaque élément fluide dans la zone de mélange. Pour la densité, la source est constituée des fluides purs de part et d'autre de la zone de mélange et qui y sont incorporés au fur et à mesure de son évolution.

Le champ des fluctuations de densité instantanées donne cependant des résultats raisonnables et peut être gardé comme solution rapide car il ne requiert pas d'équation supplémentaire de filtrage à incorporer dans le code.

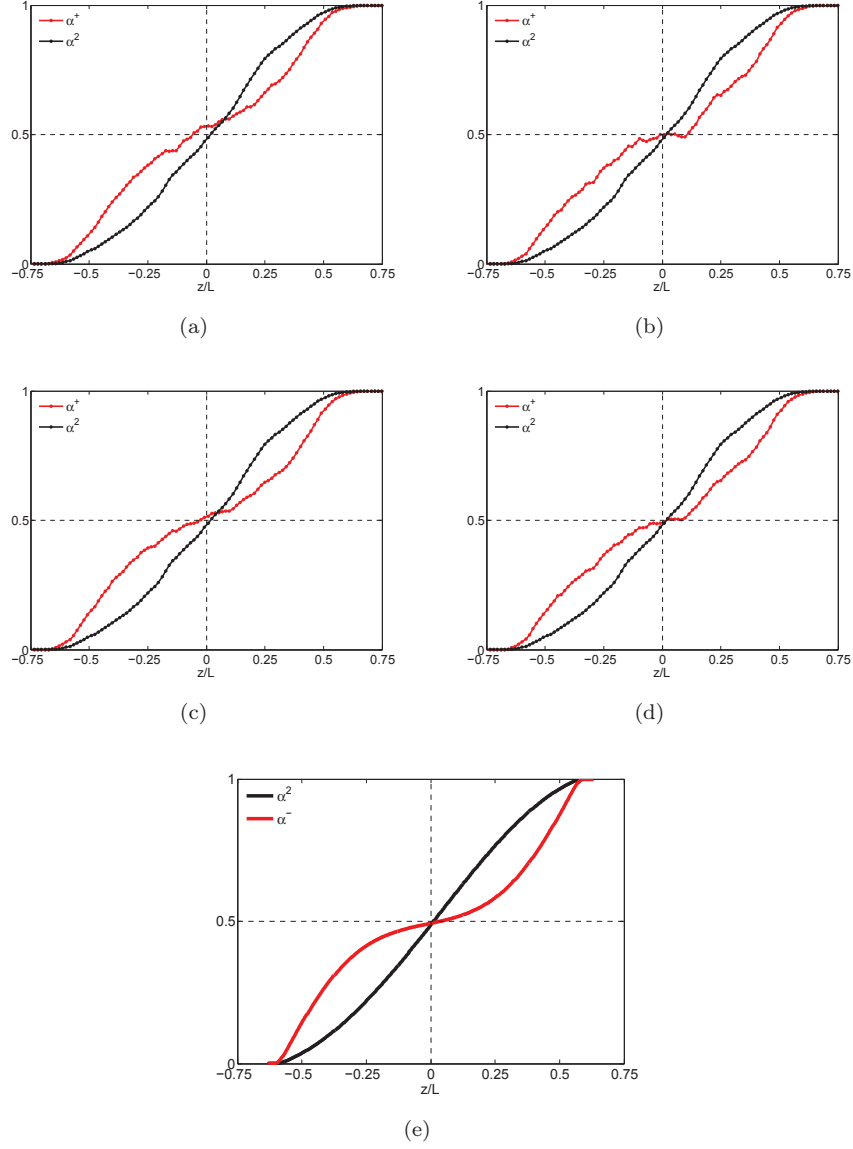


FIG. 4.14 – Fractions volumiques α^+ et α^2 du champ de structures b^+ et du fluide lourd 2 au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.

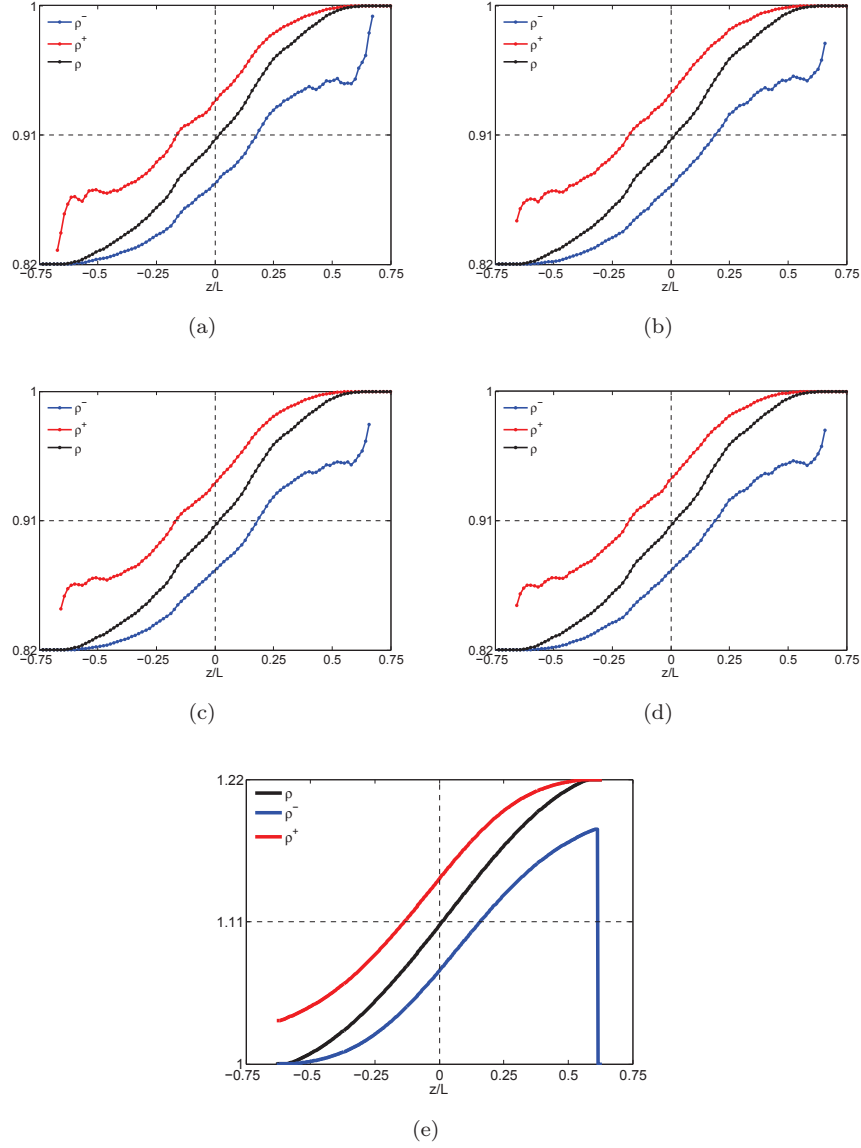


FIG. 4.15 – Densité totale ρ et par champs de structures $\rho^\pm$ au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.

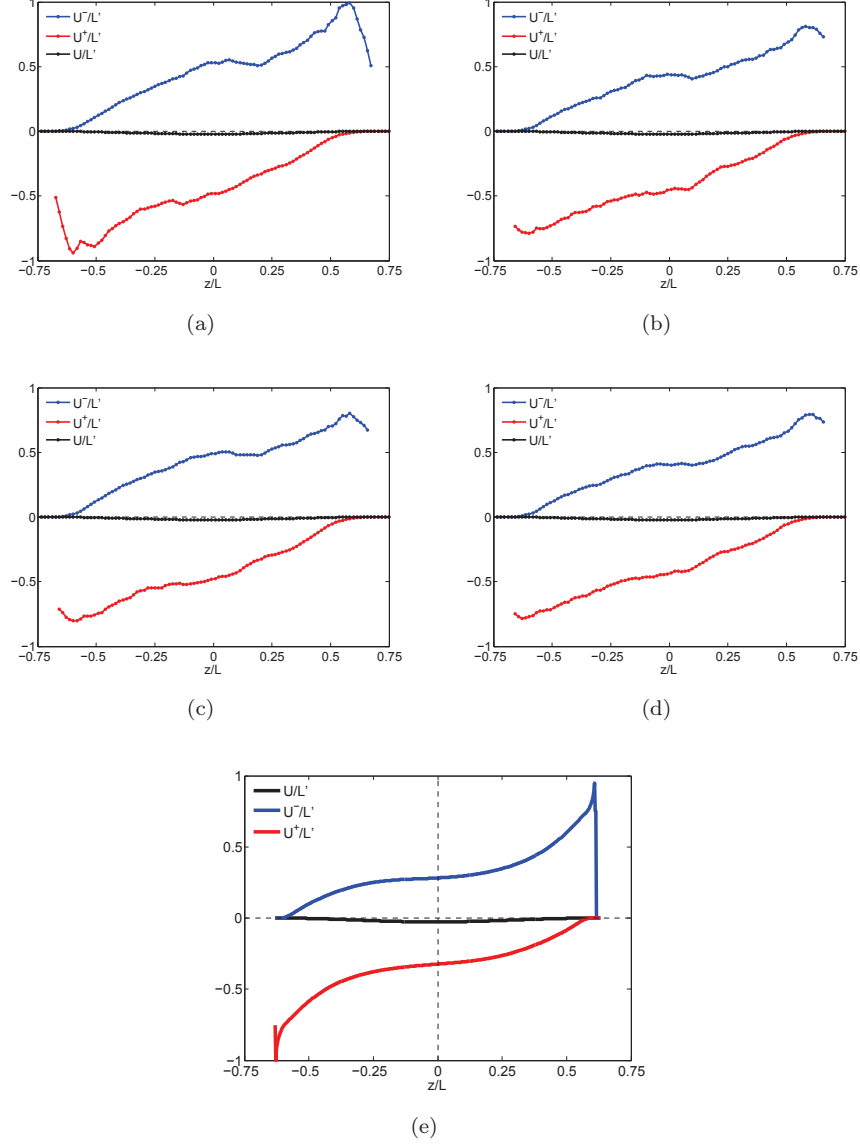


FIG. 4.16 – Vitesses verticales totales U_z et par champs de structures $U_z^\pm$ au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, et (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.

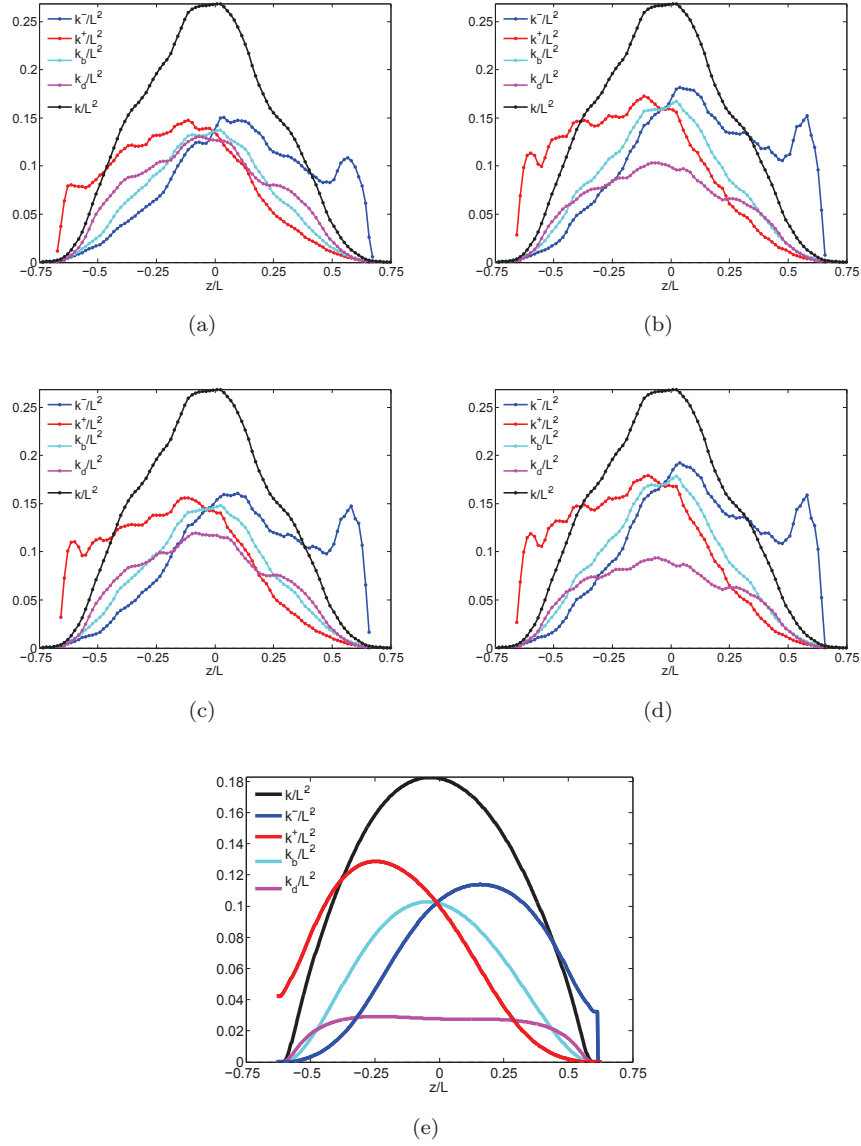


FIG. 4.17 – Différents termes d'énergie au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenus avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, et (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenus avec (e) le modèle 2SFK.

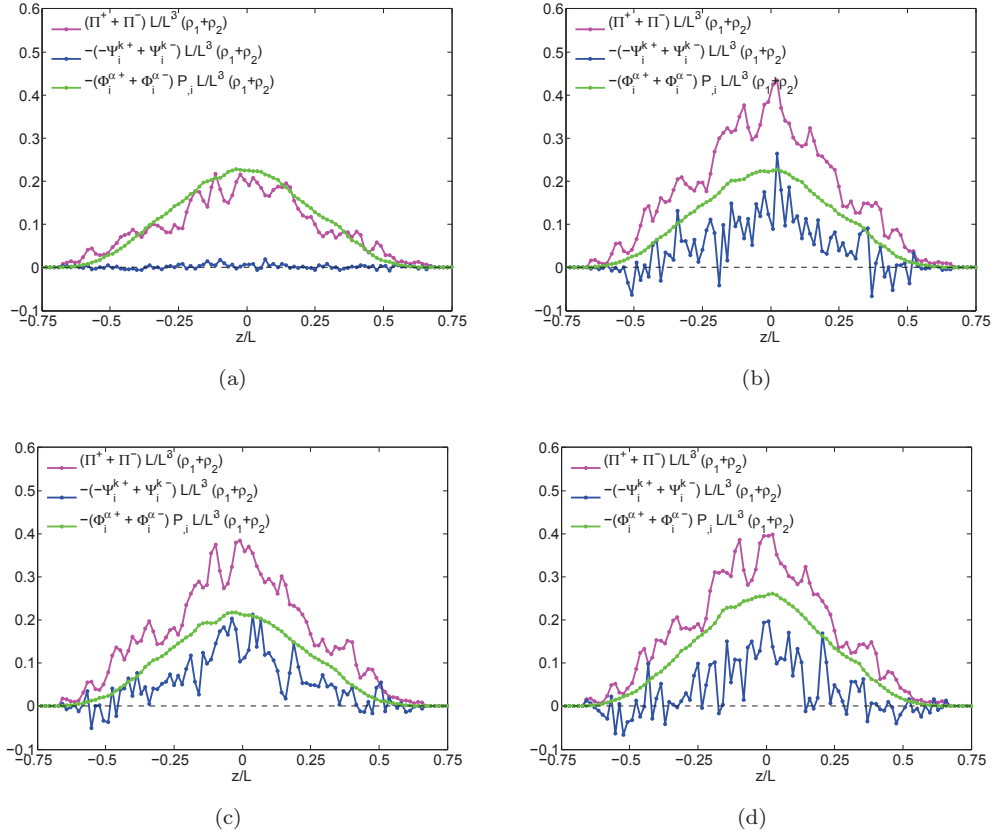


FIG. 4.18 – Termes de travail de la traînée (en rouge), production par échange de turbulence (en bleu) et production de Rayleigh–Taylor intra-structure (en vert) obtenues au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) avec les fluctuations de (a) la vitesse verticale instantanées, (b) la densité instantanées, (c) la vitesse verticale filtrées, (d) la densité filtrées.

Comparaison des résultats des SND avec le modèle statistique 2SFK

La méthode de détection de structures a pour but de calculer par simulation numérique directe (SND) les mêmes corrélations statistiques obtenues avec le modèle 2SFK. Nous avons pour cela lancé une SND d'une instabilité de Rayleigh–Taylor de 512^3 mailles. Ce chapitre expose les premiers résultats et comparaisons avec le modèle afin de mettre en avant leurs points communs mais également leurs différences. Cependant, il n'expose pas un travail complet de validation qui comporterait une analyse poussée des différentes fermetures du modèle.

Nous présentons en première partie le développement des équations d'évolution moyennes conditionnées par les champs de structures $b^\pm$. Nous présentons ensuite quelques corrélations statistiques utiles à une première analyse des résultats.

5.1 Moyennes conditionnées par les champs de structures

Le principe de l'approche bi-structure est de considérer une couche de mélange comme séparable en deux champs topologiques dits champs de structures $b^\pm$. Ainsi, il est possible d'étudier la physique intra- mais aussi inter-structures du mélange. Pour cela, il faut conditionner les équations d'évolution par les champs $b^\pm$ puis les moyenner. Il est alors possible d'étudier les différents termes de flux, d'échange ou de production le long de la zone de de mélange.

5.1.1 Équations non-moyennées

L'évolution de $b^\pm$ est supposée continue, cela permet d'introduire une vitesse de déplacement de l'interface entre structures w_i . Les équations d'évolutions locales des structures, des concentrations massiques de fluide, de densité (entre crochets car redondante avec celles des concentrations massiques) et de quantité de mouvement sont :

$$\partial_t(b^\pm) + b_{,i}^\pm w_i = 0 , \quad (5.1a)$$

$$\partial_t(\rho c^m) + (\rho c^m u_i)_{,i} = -\phi_{i,i}^m , \quad (5.1b)$$

$$\left[\partial_t(\rho) + (\rho u_i)_{,i} = 0 \right] , \quad (5.1c)$$

$$\partial_t(\rho u_i) + (\rho u_i u_j)_{,j} = -p_{,i} + \tau_{ij,j} + \rho g_i , \quad (5.1d)$$

où nous postulons que le mélange des deux fluides, $m = 2$ et $m = 1$, est idéal, c'est-à-dire que

$$c^1 + c^2 = 1 , \quad (5.2a)$$

$$\phi_i^1 + \phi_i^2 = 0 , \quad (5.2b)$$

$$\frac{c^1}{\rho_1} + \frac{c^2}{\rho_2} = \frac{1}{\rho} . \quad (5.2c)$$

L'incompressibilité et l'homogénéité des fluides entraînent que

$$u_{i,i} + \frac{\phi_{i,i}^1}{\rho_1} + \frac{\phi_{i,i}^2}{\rho_2} = 0 . \quad (5.3)$$

5.1.2 Équations 2SF moyennes conditionnées

Les équations 2SF moyennes conditionnées donnent les évolutions bi-structure des équations moyennes des fractions volumiques des champs de structures 5.6a, des fractions massiques des fluides 5.6b, de la densité 5.6c, et de la quantité de mouvement 5.6d. Celles-ci sont obtenues en conditionnant puis moyennant les équations d'évolution locales.

$$(5.6a) \equiv \overline{(5.1a)} , \quad (5.4a)$$

$$(5.6b) \equiv \overline{b^\pm(5.1b)} , \quad (5.4b)$$

$$\left[(5.6c) \equiv \overline{b^\pm(5.1b)(m=1) + b^\pm(5.1b)(m=2)} \right] , \quad (5.4c)$$

$$(5.6d) \equiv \overline{b^\pm(5.1d)} , \quad (5.4d)$$

$$(5.6e) \equiv \overline{b^\pm \times (5.1d) \cdot \mathbf{u}} - (5.6d) \cdot \mathbf{U}^\pm . \quad (5.4e)$$

Pour tous les calculs de conditionnement, les équations sont développées en utilisant :

$$w_i = (w_i - u_i) + u_i , \quad (5.5a)$$

$$b^\pm \partial_t Q_i = \partial_t(b^\pm Q_i) - b^\pm \partial_t Q_i , \quad (5.5b)$$

$$b_{,i}^\pm Q_i = (b^\pm Q_i)_{,i} - b^\pm Q_{i,i} , \quad (5.5c)$$

où Q est une quantité quelconque.

Cela donne alors :

$$\partial_t(\alpha^\pm) + (\alpha^\pm U_i^\pm)_{,i} = -\Phi_{i,i}^{\alpha^\pm} \mp \Psi^\alpha - \overline{b^\pm(\phi_i^1/\rho_1 + \phi_i^2/\rho_2)}_{,i} , \quad (5.6a)$$

$$\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm C^{m\pm}) + (\alpha^\pm \rho^\pm C^{m\pm} U_i^\pm)_{,i} = -\Phi_{i,i}^{m\pm} \mp \Psi^m - \overline{(b^\pm \phi_i^m)_{,i} + b_{,i}^\pm \phi_i^m} , \quad (5.6b)$$

$$\left[\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm) + (\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm)_{,i} \mp \Psi^\rho \right] , \quad (5.6c)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm) + (\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm U_j^\pm)_{,j} = & -R_{ij,j}^\pm \mp \Psi_i^u - \alpha^\pm P_{,i} \mp (\alpha^+ \alpha^- \delta P)_{,i} \mp D_i \\ & + \alpha^\pm \rho^\pm g_i + \overline{(b^\pm \tau_{ij})_{,j} - b_{,j}^\pm \tau_{ij}} , \end{aligned} \quad (5.6d)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm k^\pm) + (\alpha^\pm \rho^\pm k^\pm U_i^\pm)_{,i} = & -\Phi_{i,i}^{k^\pm} \mp \Psi^{k^\pm} - R_{ij}^\pm U_{i,j}^\pm - \Phi_i^{\alpha^\pm} P_{,i} \\ & - \Phi_{i,i}^{p^\pm} + \Pi^{d^\pm} + \Theta^{p^\pm} + \overline{(b^\pm \tau_{ij}(u_i - U_i^\pm))_{,j}} \\ & - \overline{b_{,j}^\pm \tau_{ij}(u_i - U_i^\pm)} - \overline{b^\pm \tau_{ij}(u_{i,j} - U_{i,j}^\pm)} , \end{aligned} \quad (5.6e)$$

avec les définitions suivantes des quantités moyennées

$$\alpha^\pm = \overline{b^\pm} , \quad (5.7a)$$

$$\alpha^\pm \rho^\pm = \overline{b^\pm \rho} , \quad (5.7b)$$

$$\alpha^\pm \rho^\pm C^{m\pm} = \overline{b^\pm \rho C^m} , \quad (5.7c)$$

$$\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm = \overline{b^\pm \rho u_i} , \quad (5.7d)$$

$$\alpha^\pm \rho^\pm k^\pm = \overline{b^\pm \rho (\mathbf{u} - \mathbf{U}^\pm)^2 / 2} , \quad (5.7e)$$

$$\alpha^\pm P^\pm = \overline{b^\pm p} , \quad (5.7f)$$

$$P = \alpha^+ P^+ + \alpha^- P^- , \quad (5.7g)$$

$$\delta P = P^+ - P^- , \quad (5.7h)$$

des flux turbulents par structure

$$\Phi_i^{\alpha\pm} = \overline{b^\pm(u_i - U_i^\pm)} = \alpha^\pm(V_i^\pm - U_i^\pm) , \quad (5.8a)$$

$$\Phi_i^{m\pm} = \overline{b^\pm \rho c^m(u_i - U_i^\pm)} , \quad (5.8b)$$

$$\left[\Phi_i^{\rho\pm} = \Phi_i^{1\pm} + \Phi_i^{2\pm} = 0 \right] , \quad (5.8c)$$

$$R_{ij}^\pm = \overline{b^\pm \rho(u_i - U_i^\pm)(u_j - U_j^\pm)} , \quad (5.8d)$$

$$\Phi_i^{k\pm} = \overline{b^\pm \rho(\mathbf{u} - \mathbf{U}^\pm)^2(u_i - U_i^\pm)/2} , \quad (5.8e)$$

des termes d'échanges associés au transfert de volume entre structures (ces termes sont décomposés suivant leur partie amont $\uparrow$ et aval $\downarrow$, et il est à noter que les termes $\Psi^{k\pm}$ ne sont pas des termes d'échange purement symétriques),

$$\Psi^\alpha = \pm \overline{b_{,i}^\pm(w_i - u_i)} = \overline{\uparrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\uparrow} + \overline{\downarrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\downarrow} , \quad (5.9a)$$

$$\Psi^m = \pm \overline{b_{,i}^\pm(w_i - u_i)\rho c^m} = \overline{\uparrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\uparrow \rho c^m} + \overline{\downarrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\downarrow \rho c^m} , \quad (5.9b)$$

$$\left[\Psi^\rho = \Psi^1 + \Psi^2 = \pm \overline{b_{,i}^\pm(w_i - u_i)\rho} = \overline{\uparrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\uparrow \rho} + \overline{\downarrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\downarrow \rho} \right] , \quad (5.9c)$$

$$\Psi_i^u = \pm \overline{b_{,j}^\pm(w_j - u_j)\rho u_i} = \overline{\uparrow b_{,j}^+(w_j - u_j)\uparrow \rho u_i} + \overline{\downarrow b_{,j}^+(w_j - u_j)\downarrow \rho u_i} , \quad (5.9d)$$

$$\begin{aligned} \Psi^{k\pm} &= \pm \overline{b_{,i}^\pm(w_i - u_i)\rho(\mathbf{u} - \mathbf{U}^\pm)^2/2} \\ &= \overline{\uparrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\uparrow \rho(\mathbf{u} - \mathbf{U}^\pm)^2/2} + \overline{\downarrow b_{,i}^+(w_i - u_i)\downarrow \rho(\mathbf{u} - \mathbf{U}^\pm)^2/2} , \end{aligned} \quad (5.9e)$$

avec comme fonctions « amont » et « aval »

$$\uparrow x \downarrow = \frac{x + |x|}{2} , \quad \downarrow x \uparrow = \frac{x - |x|}{2} , \quad (5.10)$$

et enfin des termes liés à la pression

$$D_i = \mp \overline{b_{,i}^\pm(p - P)} . \quad (5.11a)$$

$$\Phi_i^{p\pm} = \overline{b^\pm(p - P)(u_i - U_i^\pm)} , \quad (5.11b)$$

$$\Pi^{d\pm} = \overline{b_{,i}^\pm(p - P)(u_i - U_i^\pm)} . \quad (5.11c)$$

$$\Theta^{p\pm} = \overline{b^\pm(p - P)(u_{i,i} - U_{i,i}^\pm)} . \quad (5.11d)$$

Les termes de production d'énergie turbulente sont mélangés avec les termes d'échange, et leurs sommes sur les deux champs de structures sont liées au travail des échanges de quantité de mouvement et de traînée.

$$-\Psi^{k+} + \Psi^{k-} = [\Psi_i^u - \Psi^\rho(U_i^+ + U_i^-)/2](U_i^+ - U_i^-) , \quad (5.12a)$$

$$\Pi^{d+} + \Pi^{d-} = D_i(U_i^+ - U_i^-) . \quad (5.12b)$$

Cela justifie la notation $\Pi^{d\pm}$. Il faut garder en mémoire que la traînée apparente contient ici des effets de masse ajoutée qui sont traités séparément dans le modèle 2SFK.

Dans la SND, les termes de flux de diffusion moléculaire et des contraintes visqueuses sont délicats à évaluer directement en raison des termes aux petites échelles qui introduisent du bruit. Ils sont alors obtenus comme résidus du bilan des équations moyennées. Un de ces termes donne la dissipation d'énergie turbulente par structure

$$\alpha^\pm \rho^\pm \varepsilon^\pm = \overline{b^\pm \tau_{ij}(u_{i,j} - U_{i,j}^\pm)} . \quad (5.13)$$

Le travail de la traînée visqueuse est aussi retrouvé par le bilan des termes de surface.

$$\overline{b_{,j}^+ \tau_{ij}(u_i - U_i^+)} + \overline{b_{,j}^- \tau_{ij}(u_i - U_i^-)} = -\overline{b_{,j}^+ \tau_{ij}(U_i^+ - U_i^-)} . \quad (5.14)$$

5.2 Simulation 512^3 d'une instabilité de Rayleigh–Taylor avec détection de structures par vitesse filtrée

Afin de procéder à la comparaison des résultats SND/2SFK, une simulation numérique directe de 512^3 mailles à nombre d'Atwood $A = 0,1$ a été faite. La figure 5.1 montre les différents profils d'évolution du coefficient de croissance et du bilan d'énergie, et de comportement spectral de la simulation.

Cette simulation regroupe bien toutes les caractéristiques inhérentes à une instabilité de Rayleigh–Taylor avec :

- un coefficient de croissance de $\alpha = 0,037$,
- un nombre de Reynolds de $Re = (LL')/\nu \approx 10000$ en fin de simulation,
- un bilan d'énergie classique avec un rapport $K/K_d = 0,45$ en fin de simulation,
- un spectre, en milieu de zone de mélange, présentant une cascade inertielle sur environ une demie-décade,
- un coefficient de mélange mono-fluide de $\Theta_m = 0,82$.

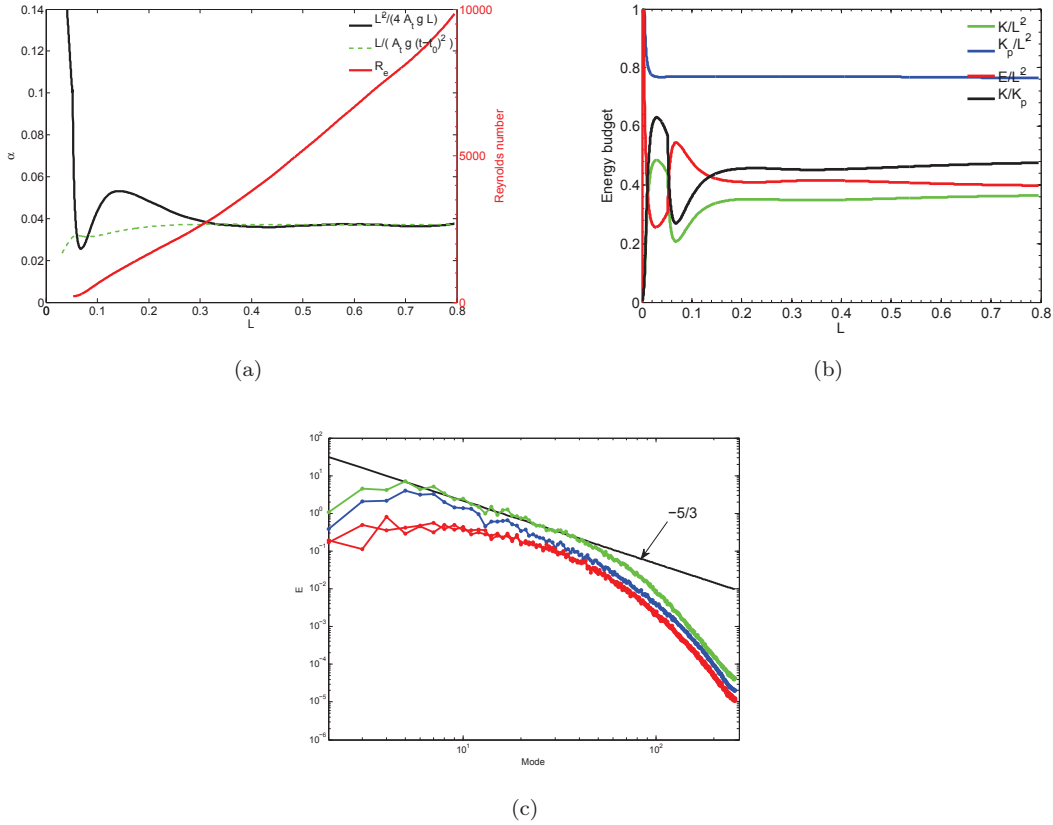


FIG. 5.1 – Caractéristiques importantes d'une instabilité de Rayleigh–Taylor au temps $t = 10,3$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) : (a) coefficient de croissance et nombre de Reynolds, (b) bilan d'énergie, et (c) spectre d'énergie des champs physiques. Ces résultats peuvent être comparés à ceux obtenus pour une simulation 256^3 et exposées figures 3.7, 3.8 et 3.9.

La figure 5.2 représente, au temps $t = 10,3$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), les champs de densité ρ , de vitesse verticale instantanée u_z et de structure b^+ . Elle montre aussi les caractéristiques importantes de la méthode de filtrage utilisée, soit le champ filtré $\tilde{u}'$, ainsi que la fonction de distribution $p(\tilde{u}'/L', z/L)$ et le profil de bimodalité $\beta^u(z)$. Les paramètres de filtrage sont $C_\phi = 0,5$, $C_\varepsilon = 2,0$, $C_k = 1,5$ et $C_A = 4,0$. Il a fallu augmenter le temps de filtrage de la vitesse verticale, par rapport à la simulation 128³, pour obtenir une bonne bimodalité tout le long de la zone de mélange. Celle-ci s'avère être plutôt bonne avec un coefficient $\beta^{\tilde{u}'}$ d'environ 1,7, soit la même valeur que pour les simulations 128³ (voir figures 4.8 à 4.11) alors que la turbulence est y bien moins forte qu'ici et donc plus facile à filtrer.

5.3 Quantités importantes et corrélations statistiques pour la comparaison SND/2SFK

Les corrélations statistiques des différents termes des équations 5.6a, 5.6b, 5.6d et 5.6e sont les quantités à étudier. Un sous-programme Fortran, développé par John Redford du CMLA, permet d'obtenir durant la SND les différentes corrélations statistiques décrites précédemment. Seules les quantités et corrélations importantes et utiles pour notre analyse sont présentées, soit :

- la surface inter-faciale du champ de structure,
- le coefficient de mélange bi-structure,
- les quantités d'évolution de fractions volumiques, densité et vitesse,
- le terme d'échange de volume,
- les termes d'énergie et de transfert/production d'énergie.

La totalité des corrélations statistiques introduites avec les équations conditionnées et moyennées 2SF est présentée en annexe.

5.3.1 Surface inter-faciale

On introduit A_{int} comme l'aire de l'interface définie par la frontière entre les champs de structures $b^\pm$ dans le volume $V = H^3 = 1^3$ de notre boîte de calcul. $b^\pm$ étant complémentaires, nous utilisons b^+ pour calculer l'aire.

$$A_{\text{int}} = \int_V |\partial_i b^+| dV. \quad (5.15)$$

Cette formule est discrétisée pour le calcul dans la simulation. Cela suppose donc une surface régulière et exclut de facto les surfaces de type fractal.

On peut faire un calcul d'ordre de grandeur de l'aire inter-faciale en considérant les structures turbulentes comme sphéroïdales et de taille caractéristique ℓ . On a alors :

$$A_{\text{int}} \sim N\ell^2, \quad (5.16)$$

où N est le nombre total de structures présentes dans la boîte de calcul, soit :

$$N \sim \frac{H^2 L}{l^3}. \quad (5.17)$$

Cela donne alors :

$$A_{\text{int}} \sim \frac{L}{\ell} H^2. \quad (5.18)$$

Supposons qu'une IRT aie atteint son régime auto-semblable, tous les champs physiques présents sont donc auto-semblables et peuvent être normalisés par la taille L et vitesse d'évolution L' de la zone de mélange. La méthode de détection de $b^\pm$ est passive, autonome et ne contient aucun nouveau terme source, et les structures vont alors évoluer de façon auto-semblable. On en déduit que la taille

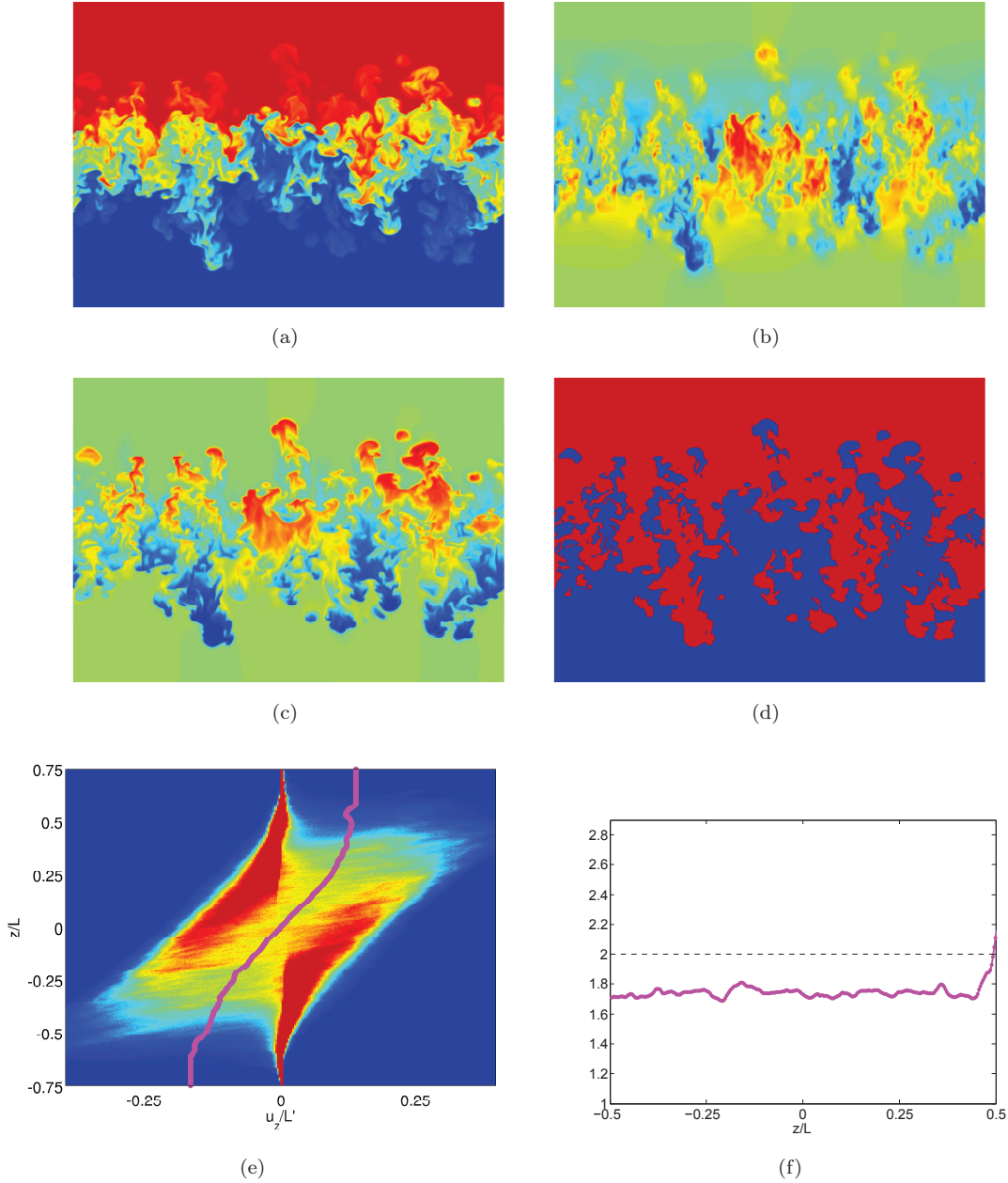


FIG. 5.2 – Cartes en niveaux de couleurs dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t = 10,3$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), pour les champs de (a) densité ρ , (b) vitesse verticale instantanée u_z , (c) fluctuations de la vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) présence de structures b^+ construit avec $\tilde{u}'$, (e) et la fonction de distribution $p(\tilde{u}'/L', z/L)$, ainsi que (f) le profil de bimodalité $\beta^u(z)$. Ces résultats peuvent être comparés à ceux exposés sur les figures 4.8 à 4.11.

moyenne des structures turbulentes ℓ est proportionnelle à l'épaisseur de la zone de mélange $\ell \sim L$. Ainsi, si le champ de structures est auto-semblable, son aire inter-faciale converge vers une valeur constante $A_{\text{int}} \sim H^2$ dans nos simulations.

La figure 5.3 montre l'évolution suivant L de A_{int} . La courbe semble converger assez tardivement.

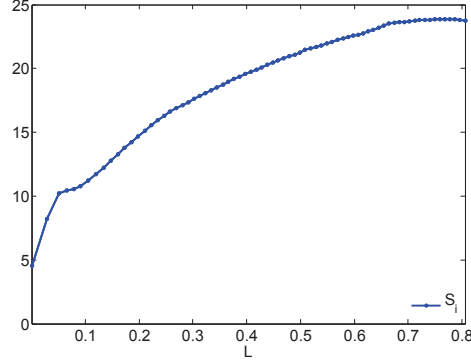


FIG. 5.3 – Évolution de l'aire inter-faciale A_{int} suivant L . La faible convergence de la courbe pourrait s'expliquer par la présence d'une phase transitoire qui empêche d'obtenir une réelle auto-similarité du mélange et/ou par le comportement fractal de l'interface dû aux fluctuations non-filtrées du champs de vitesse.

Deux phénomènes pourraient être responsables :

- le filtrage temporel crée une phase transitoire, en plus de celles présentes dans le mélange, qui retarde le régime auto-semblable des structures (indépendamment de l'évolution physique du système, plus rapide).
- La détection crée une interface raide entre structures en utilisant un champ fluctuant à toutes les échelles. L'interface peut alors avoir un comportement fractal, entraînant la divergence de A_{int} , ou du moins sa non-convergence dans nos simulations.

5.3.2 Coefficient de mélange bi-structure

Le coefficient de mélange Θ quantifie l'homogénéité du mélange. Ainsi, si $\Theta = 0$, le mélange est non-miscible et si $\Theta = 1$, le mélange est homogène. Dans le cas mono-fluide, ce coefficient est défini par les fractions volumiques des fluides lourd α^2 et léger α^1 :

$$\Theta_m = \frac{\int \overline{\alpha^1 \alpha^2} dz}{\int \overline{\alpha^1} \overline{\alpha^2} dz}. \quad (5.19)$$

Nous voulons déterminer le coefficient de mélange en utilisant l'approche bi-structure. Pour cela, nous faisons apparaître les champs de structures $b^\pm$ dans l'équation 5.19 :

$$\Theta_m = \frac{\int \overline{(b^+ + b^-) \alpha^1 \alpha^2} dz}{\int \overline{\alpha^1} \overline{\alpha^2} dz} = \frac{\int \overline{b^+ \alpha^1 \alpha^2} + \overline{b^- \alpha^1 \alpha^2} dz}{\int \overline{\alpha^1} \overline{\alpha^2} dz}. \quad (5.20)$$

Le modèle 2SFK considère un mélange homogène dans chaque structure $\pm$, et le coefficient de mélange bi-structure $\Theta^\pm$ est alors égal à 1, soit :

$$\Theta_m^\pm = \frac{\frac{\overline{b^\pm \alpha^1 \alpha^2}}{\overline{b^\pm}}}{\frac{\overline{b^\pm \alpha^1}}{\overline{b^\pm}} \frac{\overline{b^\pm \alpha^2}}{\overline{b^\pm}}} = 1. \quad (5.21)$$

En définissant $\alpha^{m\pm}$ comme les fractions volumiques du fluide m dans les champs de structures $b^\pm$

$$\alpha^{m\pm} = \frac{\overline{b^\pm \alpha^m}}{\overline{b^\pm}}, \quad (5.22)$$

on a alors

$$\overline{b^\pm \alpha^1 \alpha^2} = \overline{b^\pm} \frac{\overline{b^\pm \alpha^1}}{\overline{b^\pm}} \frac{\overline{b^\pm \alpha^2}}{\overline{b^\pm}} = \alpha^\pm \alpha^{1\pm} \alpha^{2\pm}. \quad (5.23)$$

Le coefficient de mélange bi-structure Θ_b calculé par le modèle est alors :

$$\Theta_b = \frac{\int \overline{b^+ \alpha^1 \alpha^2} + \overline{b^- \alpha^1 \alpha^2} dz}{\int \overline{\alpha^1 \alpha^2} dz} = \frac{\int \alpha^+ \alpha^{1+} \alpha^{2+} + \alpha^- \alpha^{1-} \alpha^{2-} dz}{\int \alpha^1 \alpha^2 dz} \quad (5.24)$$

La figure 5.4 montre l'évolution du coefficient de mélange suivant les approches mono-fluide et bi-structure. Les résultats donnent un écart d'environ 10% entre les deux profils. Cela provient de l'hypothèse, dans le modèle, d'un mélange homogène dans les structures. Ainsi, les fluctuations de concentration au sein des structures, qui diminuent le coefficient de mélange, ne sont pas prises en compte dans le modèle alors qu'elles le sont dans la SND. Le coefficient de mélange bi-structure Θ_b est donc plus élevé.

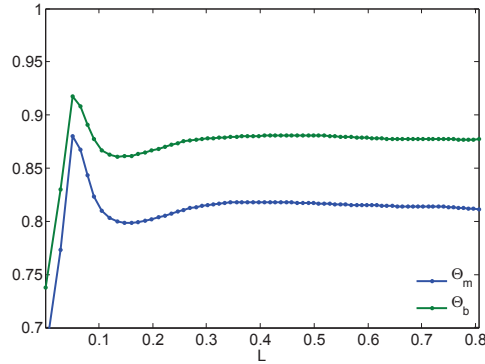


FIG. 5.4 – Évolution des coefficients de mélange mono-fluide Θ_m et bi-structure Θ_b . La différence entre les deux courbes vient de l'hypothèse de mélange homogène dans les structures par le modèle 2SFK, donnant un mélange plus fort que dans la simulation numérique.

5.3.3 Fractions volumiques, densité et vitesses des structures

La figure 5.5 représente les différentes quantités d'évolutions des équations 5.6 obtenues par la SND (indiquées $\cdot|_{\text{SND}}$) et le modèle 2SFK (indiquées $\cdot|_{\text{SFK}}$).

Les figures 5.5(a) et 5.5(b) montrent les fractions volumiques de fluide lourd et de structure +. La tendance de α^+ par rapport à α^2 est la même pour la simulation et pour le modèle. La répartition du volume de fluide dans le champ de structures est cependant différente. Le plateau présent dans α_{SFK}^+ est inexistant dans α_{SND}^+ et dénote donc (voir équation 5.6a) des échanges nets de volume de fluide inter-structures $\Psi_{\text{SND}}^{\alpha^+} + \Psi_{\text{SND}}^{\alpha^-}$ et des variations de flux de volume $\Phi_{i,i}^{\pm}|_{\text{SND}}$ plus faibles qu'avec le modèle 2SFK. Cela pourrait venir d'un défaut de détection des frontières de structures, mais il est aussi important de noter que le modèle 2SFK utilise une hypothèse de diffusion exaltée [Llor 2004] qui renforce les phénomènes de diffusion et vient donc augmenter les termes de variation de flux de volume $\Phi_{i,i}^{\pm}|_{\text{SFK}}$. La figure 5.6 montre le résultat des flux turbulents de volume $\Phi_i^{\pm}$ obtenus avec la

SND et le modèle 2SFK. Les termes d'échange de volume $\Psi^{\alpha\pm}$ sont étudiés plus loin. Les flux, mais aussi leurs variations, obtenus par SND sont plus faibles d'un facteur 2 par rapport à ceux du modèle 2SFK.

Les figures 5.5(c) et 5.5(d) montrent les profils de densité. Les résultats obtenus avec la SND et

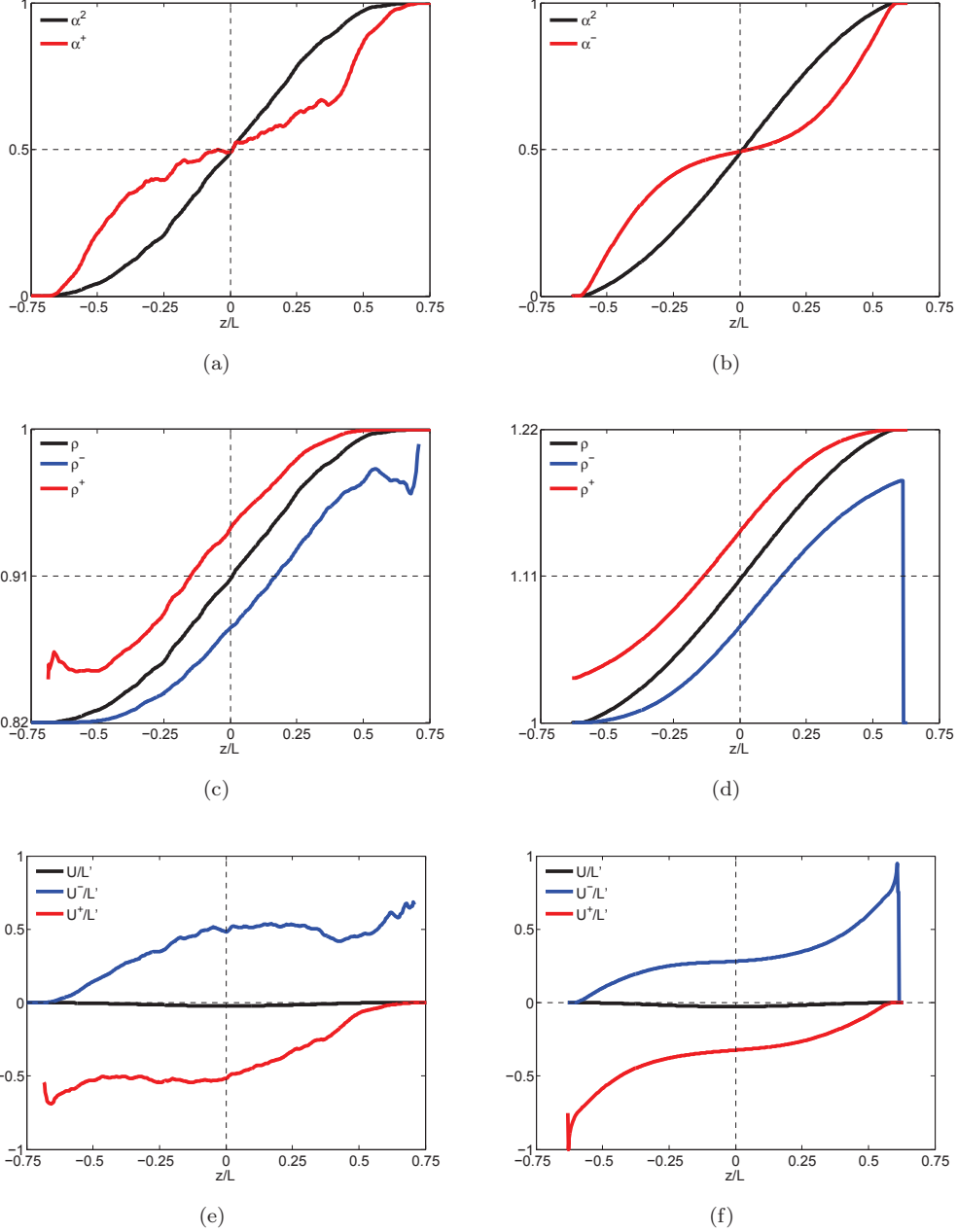


FIG. 5.5 – Profils suivant z/L des fractions volumiques du fluide lourd α^2 et du champ de structures b^+ obtenues (a) par SND et (b) par 2SFK, densités du fluide $\bar{\rho}$, et dans les champs de structures $\rho^\pm$ obtenues (c) par SND et (d) par 2SFK, vitesses verticales du fluide U_z , et dans les champs de structures $U_z^\pm$ obtenues (e) par SND et (f) par 2SFK.

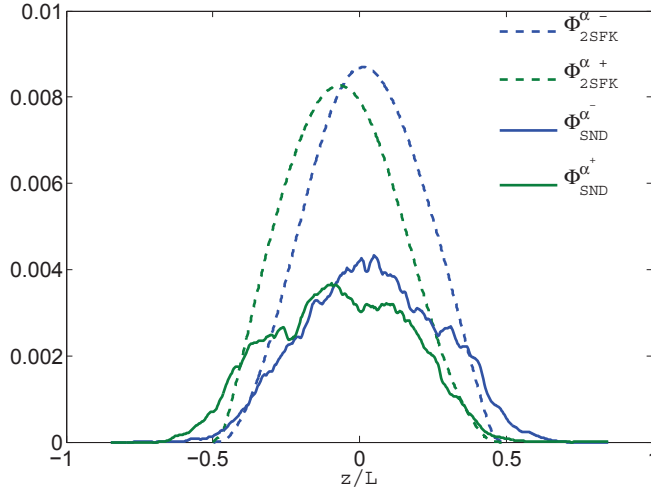


FIG. 5.6 – Profils suivant z/L des flux turbulents de volume $\Phi_i^\pm$. Les résultats obtenus par simulation sont deux fois plus faibles que ceux obtenus avec le modèle 2SFK, ce qui explique les différences perçues sur les profils $U^\pm$ exposés en figure 5.5.

avec le modèle 2SFK sont équivalents et donnent un nombre d'Atwood effectif A_e égal au sixième du nombre d'Atwood apparent A , $A_e \approx A/6$.

Les figures 5.5(e) et 5.5(f) montrent les profils de vitesse verticale. Nous retrouvons les mêmes tendances de la vitesse qui augmente jusqu'à atteindre un maximum autour de $\pm L'/2$. Cependant, les profils SND et 2SFK sont assez différents. La vitesse $U_{z\text{SND}}^\pm$ atteint un plateau de vitesse maximale pour diminuer légèrement en bordure de zone de mélange, alors que la vitesse $U_{z\text{SFK}}^\pm$ suit un profil plus « hyperbolique » et atteint donc sa vitesse maximale seulement en toute fin de zone de mélange. Cette différence peut s'expliquer avec l'étude du flux turbulent de masse. En effet, il est possible à partir de l'équation 5.6b de trouver la formule analytique suivante pour la vitesse verticale $U_z^\pm$:

$$U_z^\pm = \pm \frac{\alpha^{1\mp} \alpha^2 U_z^2 - \alpha^{2\mp} \alpha^1 U_z^1 - \alpha^\mp \rho^\mp (\Phi^{2+} - \Phi^{1-}) / (\rho^1 \rho^2)}{\alpha^{1-} \alpha^{2+} - \alpha^{2-} \alpha^{1+}} \quad (5.25)$$

La simulation est à faible nombre d'Atwood et le flux turbulent de volume trouvé par SND est faible par rapport à ceux du modèle 2SFK (voir figure 5.6), le flux turbulent de masse $\Phi_i^{m\pm}$ est alors également faible par rapport à celui de 2SFK, ce qui explique les différences de profils de la vitesse verticale.

5.3.4 Terme d'échange de volume inter-structures

Le terme d'échange de volume inter-structures Ψ^α quantifie les variations de volume dues à la différence entre la vitesse de la frontière des structures w_i et la vitesse de la matière u_i .

En bordure basse de la zone de mélange, les bulles turbulentes + évoluent dans le fluide laminaire. Leurs frontières tendent donc à englober progressivement le fluide laminaire environnant qui devient turbulent, entraînant alors une augmentation du volume de la structure +. Ceci se traduit par un transfert de volume : $-\Psi^\alpha > 0$ (voir équation 5.6a). Par symétrie, $+\Psi^\alpha > 0$ pour les structures - en bordure haute de la zone de mélange.

La figure 5.7 montre les profils d'échange de volume normalisés par L/L' . Le résultat de la SND est très bruité et ne donne pas un profil équivalent à celui du modèle. Deux phénomènes sont responsables :

- le premier est physique et numérique : la figure 5.8 représente les profils d'échange de volume trouvés avec la séparation amont et aval. Ainsi, les échanges de volume de + vers - et inversement sont grands et opposés l'un l'autre. L'échange net de volume n'est alors que le résidu de ces forts échanges, induisant un bruit dont l'amplitude est trop conséquente pour obtenir un profil précis,
- le deuxième phénomène vient de la méthode de détection de structure : la figure 5.9 présente les profils de volume d'échange obtenus par SND et 2SFK au temps initial du mélange. La turbulence est assez faible et la tendance obtenue avec la SND apparaît opposée à celle du profil 2SFK, contredisant alors le principe d'augmentation de volume des structures en bordure de zone de mélange.

Ainsi, la détection de structure ne semble pas positionner la frontière entre b^+ et b^- de façon cohérente avec le terme d'échange de volume tel que modélisé dans 2SFK.

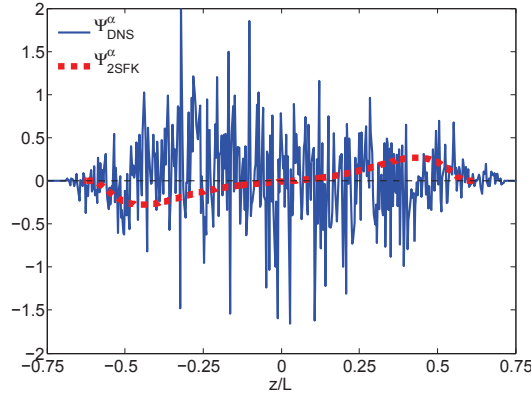


FIG. 5.7 – Profils du terme d'échange de volume inter-structures Ψ^α suivant z/L obtenus par SND et 2SFK. Le comportement obtenu par SND est inverse à celui obtenu par le modèle 2SFK.

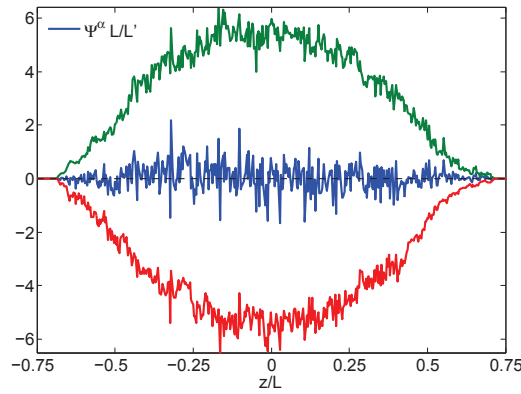


FIG. 5.8 – Profils des termes d'échanges de volume inter-structures Ψ^α , de perte de volume de la structure $+ |b_{i,i}^+(w_i - u_i)|$, et de gain de volume de la structure $+ |b_{i,i}^-(w_i - u_i)|$ suivant z/L obtenus par SND.

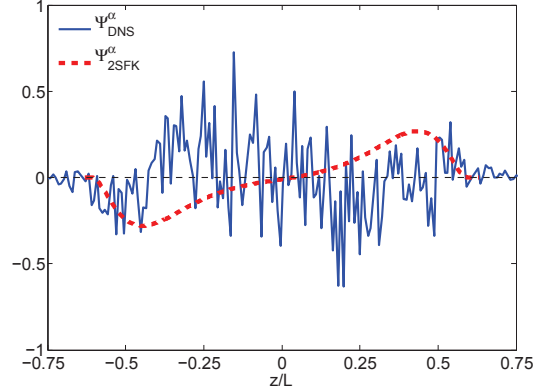


FIG. 5.9 – Profils du terme d'échange de volume inter-structures Ψ^α au temps initial suivant z/L obtenu par SND et 2SFK. Le comportement obtenu par SND est inverse à celui obtenu par le modèle 2SFK.

5.3.5 Énergies et transferts/productions d'énergie

Lorsque le mélange est initié, de l'énergie potentielle K_p est injectée par la gravité sous forme d'énergie cinétique moyenne K , et il s'ensuit des transferts (ou des productions) d'énergie en énergie cinétique turbulente k , puis enfin en énergie interne e_i . La figure 5.10 schématise ce processus pour les approches mono-fluide et bi-structure. Les énergies sont entourées par un carré et les termes de transfert (ou de production) d'énergie sont entourés par une ellipse. L'approche bi-structure fait apparaître de l'énergie dirigée K_d résultant de la séparation des structures $+$ et $-$. Nous nous intéressons premièrement aux différentes énergies cinétiques présentes dans le mélange, puis ensuite aux transferts (ou productions) de ces énergies.

5.3.5.1 Énergie (carrés)

Nous regardons ici les résultats des profils d'énergies en représentations mono-fluide et bi-structure.

L'énergie dirigée K_d est au centre de l'approche bi-structure et est séparée de l'énergie cinétique turbulente mono-fluide. Elle constitue alors une nouvelle réserve d'énergie cinétique moyenne :

$$\frac{\alpha^+ \rho^+}{\bar{\rho}} k^+ + \frac{\alpha^- \rho^-}{\bar{\rho}} k^- = k - K_d \quad (5.26a)$$

$$\frac{\alpha^+ \rho^+}{\bar{\rho}} K^+ + \frac{\alpha^- \rho^-}{\bar{\rho}} K^- = K + K_d, \quad (5.26b)$$

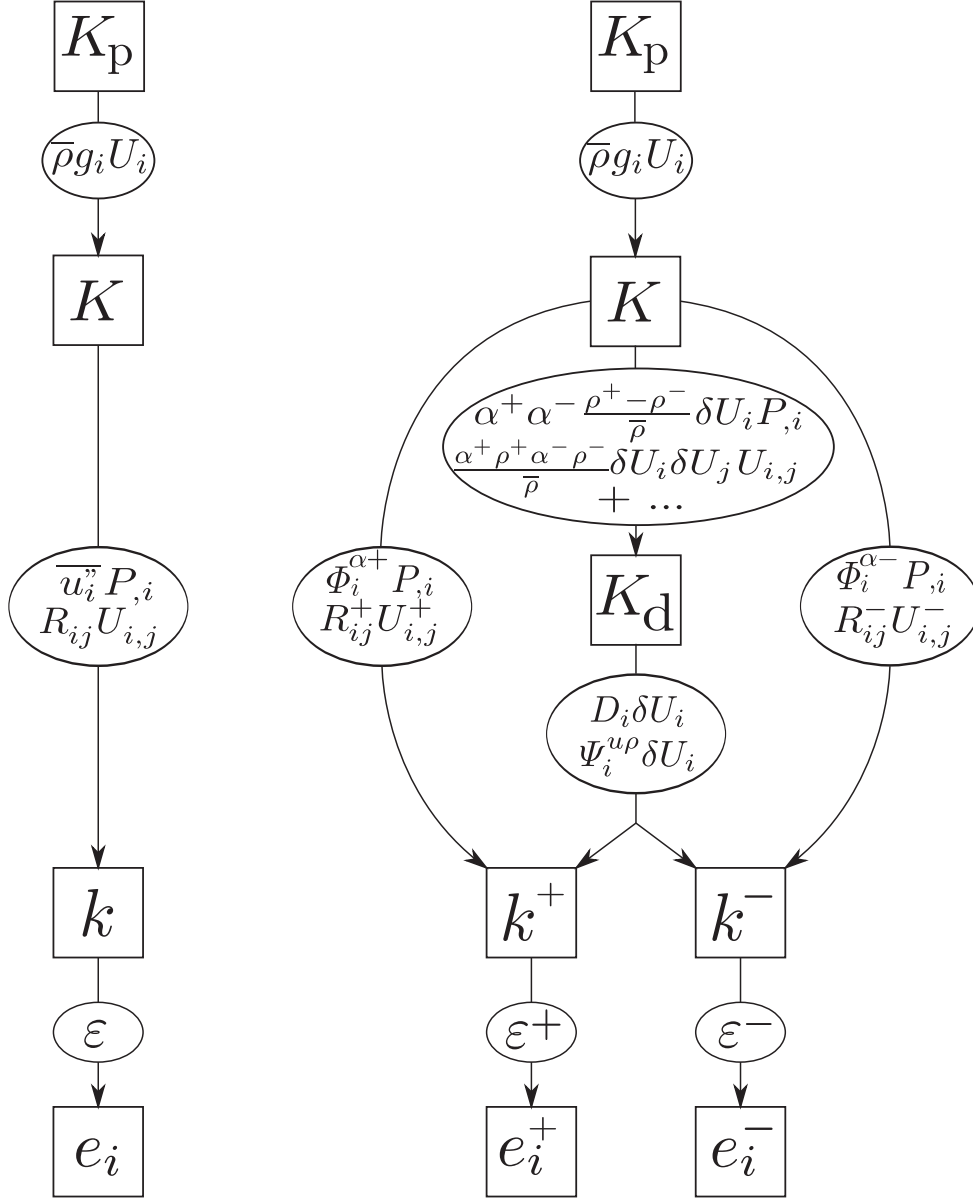


FIG. 5.10 – Processus de transfert d'énergie pour les approches mono-fluide et bi-structure. L'approche bi-fluide ou bi-structure sépare le mélange en deux champs et met avant une vitesse de dérive δU_i et une énergie dirigée K_d centrale aux processus de production d'énergie cinétique turbulente.

avec

$$u^\pm = u - U^\pm, \quad (5.27a)$$

$$\delta U = U^+ - U^-, \quad (5.27b)$$

$$K_d = B^+ B^- (\delta \mathbf{U})^2 / 2, \quad (5.27c)$$

$$k = \frac{\overline{\rho(\mathbf{u}'')^2 / 2}}{\bar{\rho}}, \quad (5.27d)$$

$$k^\pm = \frac{\bar{b}^\pm \rho(\mathbf{u}^\pm)^2 / 2}{\bar{b}^\pm \rho}, \quad (5.27e)$$

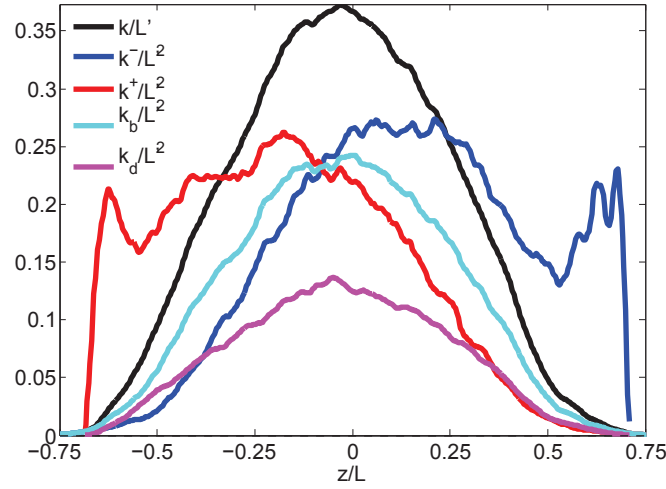
$$K = \mathbf{U}^2 / 2, \quad (5.27f)$$

$$K^\pm = (\mathbf{U}^\pm)^2 / 2, \quad (5.27g)$$

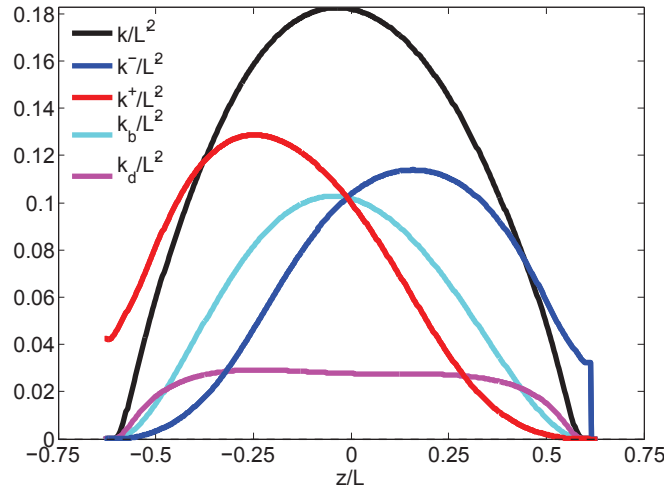
$$k_b = \frac{\alpha^+ \rho^+}{\bar{\rho}} k^+ + \frac{\alpha^- \rho^-}{\bar{\rho}} k^-. \quad (5.27h)$$

L'énergie dirigée ainsi définie permet d'estimer la pertinence de la séparation des champs de structures $b^\pm$: les meilleures reconstructions de $b^\pm$ sont a priori associées à K_d élevé.

La figure 5.11 expose les résultats des différentes énergies citées ci-dessus. Les profils de k_{SFK} , $k_{b \text{ SFK}}$ et $k_{\text{SFK}}^\pm$ sont assez proches de ceux trouvés par SND. Le modèle 2SFK retrouve bien le résultat de maxima d'énergie cinétique turbulente dans les structures $k^\pm$ décalés et symétriques par rapport à $z = 0$. Par contre, la SND capture plus d'énergie dirigée, augmentant ainsi le rapport K_d/k_b de $1/5$ à $1/2$. Cela n'est pas étonnant au vu des profils de vitesse $U_z^\pm$ et donc de δU analysés précédemment.



(a)



(b)

FIG. 5.11 – Profils des énergies mono-fluide k , et bi-structure k_b , k_d et $k^\pm$ suivant z/L définis par les équations 5.27 et exposées sur le schéma de la figure 5.10 obtenus par (a) SND, (b) et 2SFK.

5.3.5.2 Transferts/productions d'énergie (ellipses)

Les termes de transfert/production d'énergie cinétique turbulente sont aussi de première importance. Ils sont représentés par les ellipses sur la figure 5.10.

L'intérêt, ici, réside dans l'apport de l'approche bi-structure sur la production d'énergie turbulente. En approche mono-fluide, sous l'effet des fluctuations de vitesse, de l'énergie cinétique turbulente k est produite à partir de l'énergie cinétique moyenne K . Dans l'approche bi-structure, de nouveaux processus de création d'énergie cinétique moyenne et turbulente apparaissent et sont dus aux interactions entre les deux champs de structures. En effet, comme le montre la figure 5.10, l'énergie cinétique moyenne K produit aussi de l'énergie dirigée K_d qui résulte de la dérive des structures + par rapport à – ou inversement. Cette nouvelle énergie moyenne va alors à son tour produire de l'énergie cinétique turbulente $k^\pm$ via les phénomènes de traînée et d'échange inter-structures de masse et de quantité de mouvement. Cette nouvelle énergie sert ainsi de lien entre les approches mono-fluide et bi-structure.

Considérons le terme de production de l'énergie cinétique turbulente mono-fluide dit « enthalpique » ou « de Rayleigh–Taylor »

$$\overline{u''}P_{,i}. \quad (5.28a)$$

En introduisant le terme $b^+ + b^-$, le développement de l'équation 5.28a donne les contributions de chaque structure, ainsi que la contribution de leur dérive relative

$$\overline{u''}P_{,i} = (\Phi^{\alpha+}P_{,i} + \Phi^{\alpha-})P_{,i} + \alpha^+\alpha^-\frac{\rho^- - \rho^+}{\bar{\rho}}\delta U_i P_{,i}, \quad (5.28b)$$

$\Phi^{\alpha\pm}P_{,i}$ représentent les termes intra-structures de production enthalpique. Le dernier terme représente la nouvelle production d'énergie cinétique moyenne dirigée.

Ce travail peut aussi être fait pour relier le terme de production $R_{ij}U_{i,j}$ aux termes $R_{ij}^\pm U_{i,j}^\pm$ et $(\alpha^+\rho^+\alpha^-\rho^-)/\bar{\rho}\delta U_i\delta U_j\delta U_{i,j}$. Ces quantités liées aux gradients de vitesse restent cependant négligeables par rapport aux termes de gradients de pression.

Enfin, la production d'énergie cinétique turbulente dans les structures via l'énergie dirigée se fait par le travail de la traînée,

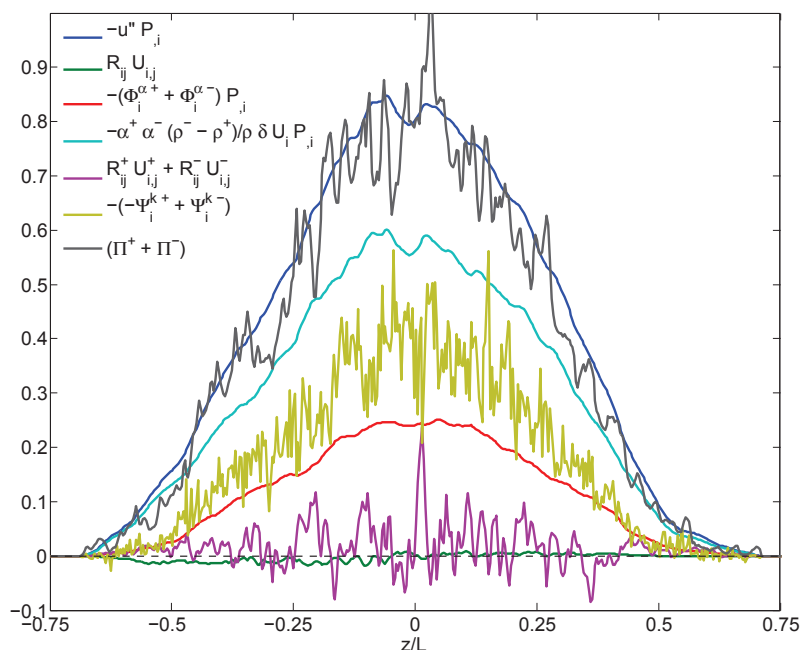
$$\Pi^{d+} + \Pi^{d-} = D_i\delta U_i, \quad (5.28c)$$

et par le travail des échanges de masse et de quantité de mouvement,

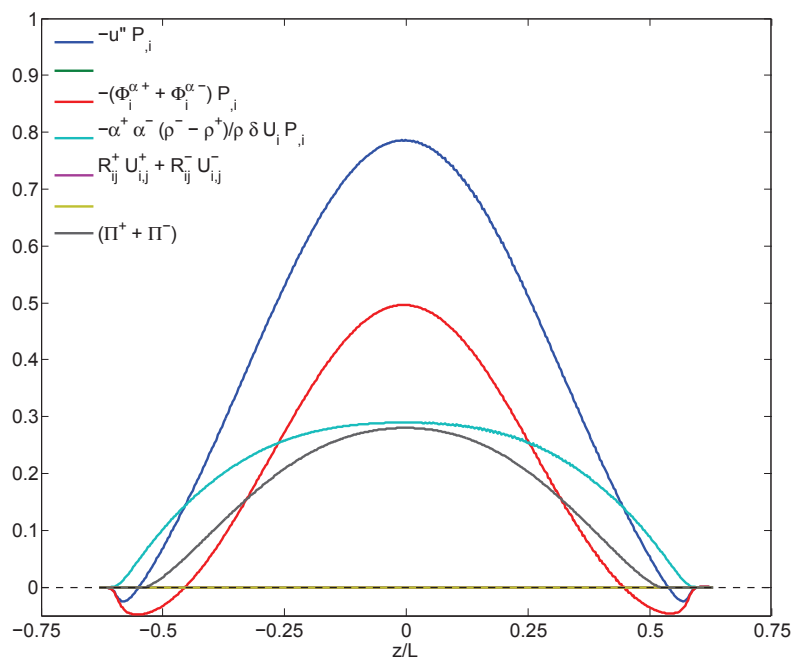
$$-\Psi^{k+} + \Psi^{k-} = [\Psi_i^u - \Psi^\rho(U_i^+ + U_i^-)/2]\delta U_i = \Psi^{u\rho}\delta U_i. \quad (5.28d)$$

La figure 5.12 représente les différents profils des termes de production d'énergie explicités ci-dessus (les termes $R_{ij}U_{i,j}$ et $-\Psi^{k+} + \Psi^{k-}$ ne sont pas accessibles simplement pour le modèle 2SFK).

L'énergie dirigée obtenue par SND étant plus forte que celle de 2SFK, il vient logiquement que les termes de production d'énergie cinétique turbulente à partir de l'énergie dirigée sont plus grands pour la SND. Le terme enthalpique, considéré comme gênant pour la modélisation, est diminué d'un facteur de l'ordre de 3 sur la SND. La production par la traînée est aussi très grande, et le rapport $(\Pi^{d+} + \Pi^{d-})/(\Phi_i^{\alpha+} + \Phi_i^{\alpha-})P_{,i}$ est de 4, soit 8 fois plus qu'avec le modèle 2SFK. Les échanges de masse et de quantité de mouvement dus à la dérive entre les champs de structures sont aussi non-négligeables. Il faut noter également que le modèle 2SFK contient des termes de masse ajoutée qui modifient $\Pi^{d+} + \Pi^{d-}$, et qui ne sont pas pris en compte ici



(a)



(b)

FIG. 5.12 – Profils des termes de production d'énergie turbulente mono-fluide $\overline{u''}P_{,i}$, $R_{ij}U_{i,j}$ et bi-structure $(\Phi_i^+ + \Phi_i^-)P_{,i}$, $R_{ij}^+U_{i,j}^+ + R_{ij}^-U_{i,j}^-$, $\alpha^+\alpha^-(\rho^- - \rho^+)/\rho\delta U_i$, $-\Psi^{k+} + \Psi^{k-}$ et $\Pi^{d+} + \Pi^{d-}$ définis par les équations 5.28 et exposé sur la figure 5.10, suivant z/L , obtenus par (a) SND, et (b) 2SFK.

Conclusion

6.1 Bref rappel du travail réalisé

Le travail présentée ici a pour objectif principal l'élaboration de méthodes de détection des champs de structures dans une couche de mélange de type Rayleigh–Taylor.

Pour cela nous avons développé, vérifié et validé un code numérique tridimensionnel, incompressible, visqueux et miscible avec diffusion moléculaire. Afin de pouvoir faire des simulations numériques directes (SND) à grand nombre de mailles, le code a été parallélisé. Des simulations à 2048^3 mailles sont désormais possibles. Plusieurs outils de traitement à la volée ont aussi été développés pour obtenir de façon efficace toutes les informations nécessaires pour l'analyse physique du mélange.

Il a fallu ensuite développer une méthode de détection de structure. Ce travail a tout d'abord permis d'améliorer sensiblement les notions et concepts établis initialement de façon intuitive voire « naïve » sur les structures turbulentes. Nous avons finalement convergé vers une approche systématique de détection de structures à l'aide du contraste et de la cohérence d'un champ physique séparateur ϕ_s tel que la vitesse, la densité, l'énergie cinétique turbulente ou encore la dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Une meilleure compréhension du comportement des structures et des premiers résultats de détection nous ont permis d'établir 7 critères généraux que doit remplir ϕ_s . Les structures turbulentes détectées sont alors des structures cohérentes en ϕ_s .

Un critère important de la détection de structures est la bimodalité de la fonction de distribution de ϕ_s . Les résultats obtenus avec les champs physiques instantanés ne peuvent remplir ce critère car les fortes fluctuations turbulentes suppriment les contrastes, en particulier au coeur de la zone de mélange. Nous avons donc introduit un filtrage temporel des fluctuations aux petites échelles afin de reconstituer une bimodalité et un contraste de ϕ_s suffisants.

Quatre champs séparateurs, donnant quatre méthodes de détection différentes, ont été retenus pour une analyse plus détaillée : les champs instantanés et filtrés des fluctuations de vitesse verticale et de densité, respectivement u' , ρ' , $\tilde{u}'$, $\tilde{\rho}'$ (voir figures 4.9 et 4.10). Une comparaison de leurs résultats sur les corrélations statistiques de base du modèle 2SFK ont permis de choisir la méthode la plus efficace, à savoir la détection par utilisation du champ filtré des fluctuations de la vitesse verticale $\tilde{u}'$.

Nous avons alors produit toutes les corrélations de l'approche bi-structure via les équations moyennes conditionnées bi-structure. Une première comparaison avec le modèle 2SFK donne des résultats qualitatifs cohérents, venant ainsi confirmer la première validation qualitative du modèle. Ces résultats donnent aussi une première validation semi-quantitative encourageante pour de futurs développements et pour une validation quantitative complète (voir figure 5.5).

6.2 Impact des résultats

Au terme de ce travail, on peut noter plusieurs résultats nouveaux d'un intérêt à la fois pratique et immédiat :

1. Il est désormais possible de réaliser de façon pertinente une détection tridimensionnelle des structures turbulentes en utilisant les contrastes des champs de fluctuations de vitesse ou de densité induits par la forte anisotropie de l'instabilité de Rayleigh–Taylor.

2. Il est également possible de déduire par SND toutes les corrélations statistiques introduites par les équations moyennes conditionnées bi-structure. Les résultats peuvent alors être comparés avec ceux des modèles bi-structure tels que celui de Youngs [Youngs 1996] ou 2SFK [Llor 2003b].
3. La détection de structures turbulentes permet de capturer au moins en partie l'énergie dirigée K_d , qui est centrale à l'approche bi-structure.
4. Les diverses méthodes étudiées produisent globalement des résultats équivalents sur les grandeurs moyennes bi-structure telles que la fraction volumique $\alpha^\pm$, la densité $\rho^\pm$, la vitesse verticale $U_z^\pm$, ou encore l'énergie cinétique turbulente $k^\pm$.
5. On pourrait considérer que certaines des méthodes explorées induisent des distorsions importantes. La détection avec la densité capture moins bien l'énergie dirigée K_d , tandis que toutes les méthodes donnent des termes d'échange et de flux de volume en contradiction apparente avec l'intuition physique de la dynamique du mélange telle qu'elle est actuellement implantée dans les modèles de Youngs et 2SFK.
6. La plus performante des méthodes explorées décompose le terme de production d'énergie cinétique turbulente (appelé terme de production enthalpique ou de Rayleigh–Taylor) suivant des contributions intra- et inter-structures (ou dirigée) dans un rapport d'environ 1/3–2/3. Cela quantifie et confirme les conjectures établies sur la base d'analyses phénoménologiques 0D [Llor 2005] et des prédictions des modèles de Youngs et 2SFK.
7. En l'état, la méthode a déjà permis de calibrer le coefficient de mélange moléculaire bi-structure du modèle 2SFK.
8. Enfin, au delà de l'IRT, la méthode de détection choisie permettrait déjà de réaliser des études qualitatives ou semi-quantitatives sur des écoulements d'importance pratique rencontrés en combustion, géophysique, astrophysique, etc.

6.3 Développements futurs

Au vu des résultats obtenus, plusieurs points pourraient être approfondis dans l'optique de résoudre les problèmes inhérents à la méthode de détection.

1. L'incohérence, pour l'instant présumée, des termes de flux et d'échanges pourrait être minimisée par l'utilisation d'une fonction de distribution bidimensionnelle combinant l'information de deux champs séparateurs tels que $(u', \tilde{u}')$. Par exemple, en prenant en compte les corrélations entre les champs instantanée et filtré, il serait alors possible de réduire l'impact du temps de réponse nécessairement introduit par le filtrage.
2. L'ajout d'un terme de diffusion dans l'équation de filtrage pourrait permettre la stabilisation plus rapide de l'aire interfaciale, la « non-fractalisation » des champs de structures, et une meilleure auto-similarité des structures turbulentes.
3. L'utilisation de champs séparateurs plus universels, tels que l'énergie cinétique turbulente k et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε , permettrait de faire une détection de structures pour d'autres instabilités comme celles de Richtmyer–Meshkov ou encore de Kelvin–Helmholtz.
4. Les méthodes de suivi des structures par équation d'un traceur passif ont été abandonnées faute de résultats probants en regard de ceux obtenus par la technique de champ séparateur. Cependant, un travail plus complet permettrait peut-être de rendre ces méthodes effectives.
5. Enfin, quel que soit les méthodes de détection utilisées, il serait utile de mettre en place une étude plus systématique de leurs impacts sur toutes les corrélations statistiques bi-structure pour, à terme, réaliser une validation complète des modèles, au premier rang desquels celui de Youngs et 2SFK.

Étude de comportement du code TURMIX3D sur les super-calculateurs de l'IDRIS

Durant ce travail de thèse, le code a été porté une première fois sur les super-calculateurs de l'Institut du Développement et des Ressources en Informatique (IDRIS/GENCI) puis une seconde fois sur ceux du Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT). Le travail d'étude du comportement du code présenté ici s'est fait en utilisant les résultats obtenus grâce à l'IDRIS. Une première partie présente le comportement du code lorsque l'on raffine le maillage de la boîte de calcul. La deuxième partie expose le comportement du code lorsque, pour un maillage donné, on augmente le nombre de processeurs pour le calcul parallèle.

A.1 Comportement du code face au raffinage

On étudie ici le comportement du code numérique lorsque le maillage de la boîte de calcul est raffiné. Trois cas différents sont étudiés : le calcul séquentiel, sur 16 puis sur 64 processeurs.

Pour les trois cas, nous utilisons la notation suivante :

- n_x : nombre de mailles sur la direction x .
- n_y : nombre de mailles sur la direction y .
- n_z : nombre de mailles sur la direction z .
- R_m : rapport de maillage qui donne le nombre de fois que nous augmentons le nombre de mailles par rapport à un nombre de mailles de référence,

$$R_m = \frac{(n_x \times n_y \times n_z)}{(n_x \times n_y \times n_z)_{\text{ref}}} . \quad (\text{A.1})$$

Ici, le nombre de mailles de référence $(n_x \times n_y \times n_z)_{\text{ref}}$ est $64^2 \times 128$.

- T_{proc} : temps total (calcul et communications) par processeur pour une itération.
- R_t : rapport de temps qui donne le nombre de fois que le temps total par processeur T_{proc} est augmenté par rapport au temps T_0 nécessaire pour le calcul sur le maillage de référence $(n_x \times n_y \times n_z)_{\text{ref}} = 64^2 \times 128$,

$$R_t = \frac{T_{\text{proc}}}{T_0} . \quad (\text{A.2})$$

Pour chaque cas, on étudie alors le courbe $R_t(R_m)$ qui donne l'augmentation du temps de calcul total en fonction de l'augmentation du nombre de mailles. Par exemple si $R_t(R_m = 2) = 2$, alors l'analyse sera que lorsqu'on multiplie par 2 le nombre de mailles, on multiplie par 2 le temps de calcul. Le code numérique a alors un comportement linéaire et symétrique (de pente 1) pour le raffinement du maillage.

A.1.1 Comportement en séquentiel (1 processeur)

La figure A.1(a) et la table A.0(a) exposent les courbes de comportement et données de calcul, explicitées précédemment, obtenues pour des calculs séquentiels sur différents maillages. Lorsque l'on augmente le nombre de mailles par 2 puis 4 ($R_m = 2$ puis 4), le code se comporte de façon linéaire avec cependant une pente légèrement supérieure à 1. Ainsi, par exemple, si l'on multiplie le nombre de mailles par 4 ($R_m = 4$), le temps de calcul est multiplié par $R_t = 4,56$. Cela met avant le fait qu'au delà de l'augmentation du nombre d'équations à calculer, il y a une augmentation de la difficulté à résoudre ces équations, c'est-à-dire que le solveur de pression met plus de temps pour converger vers la bonne solution. Multiplier par 8 le nombre de mailles augmente encore plus sensiblement le temps de calcul. Avec un tel nombre de mailles pour un seul processeur, en plus du problème du solveur de pression peut s'ajouter un problème de gestion de données qui prend plus de temps.

A.1.2 Comportement sur 16 processeurs

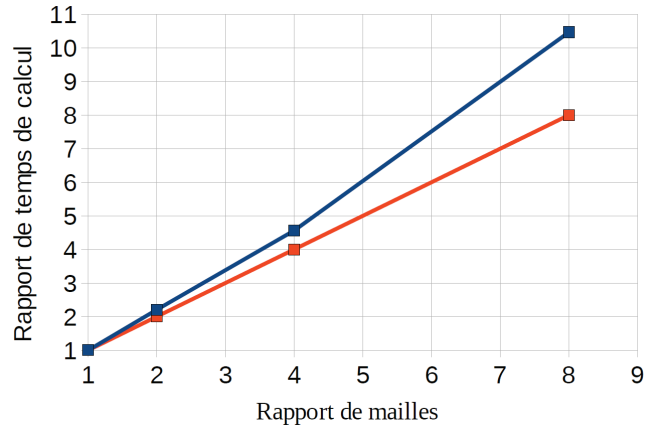
La figure A.1(b) et la table A.0(b) exposent les courbes de comportement et données de calcul, explicitées précédemment, obtenues sur différents maillages sur 16 processeurs. Le code a un comportement quasi-linéaire et symétrique, ainsi si l'on augmente de n fois le nombre de mailles ($R_m = n$), on augmentera de n fois le temps de calcul ($R_t = n$). La pente légèrement inférieure à 1 au départ expose le fait que le nombre de mailles, et donc le temps de calcul, par rapport au temps de communication des données est faible pour 16 processeurs. En effet, en raison de l'utilisation des diverses fonctions de communications, même si le nombre de mailles est très faible, le temps de communication présente une certaine limite incompressible. Ainsi, pour $R_m = 1$ ou 2, le temps de calcul augmente mais le temps de communication reste approximativement le même, le rapport de temps total R_t est alors inférieur à R_m .

A.1.3 Comportement sur 64 processeurs

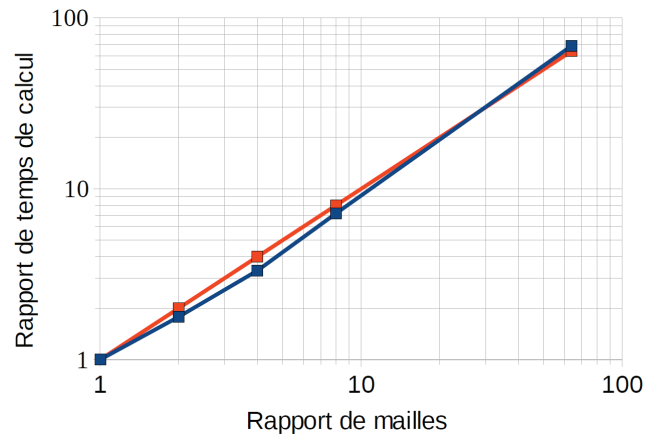
La figure A.1(c) et la table A.0(c) exposent les courbes de comportement et données de calcul explicitées en début de section obtenues pour des calculs sur différents maillages sur 64 processeurs. La faible augmentation du temps de calcul lorsque l'on multiplie le nombre de mailles par 2 expose parfaitement le phénomène du temps de communication mentionné précédemment. Le code passe alors peu de temps à calculer et beaucoup à communiquer. A partir du maillage suivant, le code acquiert un comportement complètement linéaire et de pente 1.

A.1.4 Conclusion

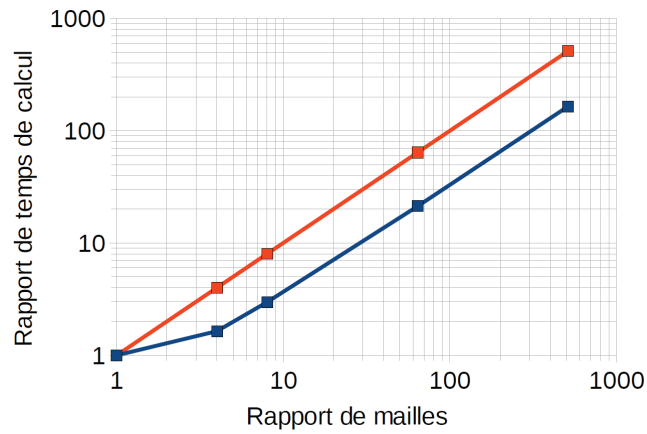
Au vu des résultats, nous pouvons dire que le code numérique TURMIX3D se comporte convenablement face au raffinement du maillage. L'augmentation du temps de calcul se fait bien linéairement par rapport au nombre de mailles considéré, sous condition cependant que le nombre de processeurs ne soit pas trop grand par rapport au nombre de mailles total.



(a) Calcul séquentiel



(b) Calcul sur 16 processeurs



(c) Calcul sur 64 processeurs

FIG. A.1 – Comportement en temps $R_t(R_m)$ du code pour un calcul : (a) séquentiel, (b) sur 16 processeurs, (c) sur 64 processeurs. En bleu : résultats numériques obtenus. En rouge : droite de pente 1 relatant un comportement linéaire et symétrique du code.

(a) Calcul séquentiel

n_x	n_y	n_z	R_m	T_{proc}	R_t
64	64	128	1	0,37 s	1
128	128	64	2	0,81 s	2,21
128	128	128	4	1,67 s	4,56
128	128	256	8	3,82 s	10,47

(b) Calcul sur 16 processeurs

n_x	n_y	n_z	R_m	T_{proc}	R_t
64	64	128	1	0,55 s	1
128	128	64	2	0,99 s	1,78
128	128	128	4	1,84 s	3,32
128	128	256	8	3,97 s	7,17
256	256	512	64	38,01 s	68,65

(c) Calcul sur 64 processeurs

n_x	n_y	n_z	R_m	T_{proc}	R_t
64	64	128	1	2,21 s	1
128	128	64	4	3,63 s	1,64
128	128	256	8	6,58 s	2,98
256	256	512	64	47,07 s	21,29
512	512	1024	512	364,32 s	164,75

TAB. A.1 – Données de calcul relatives au comportement en temps du code pour un calcul : (a) séquentiel, (b) sur 16 processeurs, (c) sur 64 processeurs.

A.2 Comportement du code face au parallélisme

On étudie ici le comportement du code numérique pour trois maillages différents, $64^2 \times 128$, $128^2 \times 256$, $256^2 \times 512$, lorsque nous augmentons le nombre de processeurs, de 1 à 128.

Pour les trois cas, nous utilisons la notation suivante :

- N_{proc} : nombre de processeurs utilisé pour faire le calcul.
- T_{proc} : temps total par processeur (calcul et communication) pour une itération.
- S_p : rapport de cadence (*Speedup* en anglais), rapport de temps qui donne le nombre de fois que le calcul est accéléré lorsque l'on passe de 1 à p processeurs.

$$S_p = \frac{T_p}{T_1}. \quad (\text{A.3})$$

- C_{tot} : coût de calcul pour une itération de calcul ($\sim N_{\text{proc}} \times T_{\text{proc}}$).
- R_C : rapport de coût qui donne le nombre de fois que le coût de calcul est augmenté par rapport au coût de calcul en séquentiel,

$$R_t = \frac{C_{\text{tot}}}{C_{\text{tot}}^{\text{seq}}}. \quad (\text{A.4})$$

On étudie alors les courbes $S_p(R_m)$ et $R_c(R_m)$. Pour une augmentation du nombre de processeurs, on peut alors connaître son côté positif, l'accélération du calcul, et son côté négatif, l'augmentation du coût du calcul.

A.2.1 Comportement sur un maillage $64^2 \times 128$

La figure A.2(a) et la table A.1(a) exposent les courbes de comportement et données de calcul, explicitées précédemment, obtenues pour des simulations sur un maillage $64^2 \times 128$ et avec différents nombres de processeurs [1, 8, 16, 64, 128]. Lorsque l'on augmente de 1 à 8 puis à 16 le nombre de processeurs, le calcul s'accélère bien de façon linéaire avec une pente légèrement inférieure à 1. Le coût total du calcul augmente faiblement et est de 1,5 pour 16 processeurs. Si l'on augmente le nombre de processeurs à 64 le rapport de cadence reste le même que pour 16 processeurs, mais le rapport de coût augmente fortement. En effet, avec un calcul sur 16 processeurs, le temps de communication atteint vraisemblablement sa valeur incompressible ; donc avec 64, même si l'on diminue le nombre de mailles par processeur, on ne diminue pas le temps pour les communications et le rapport de coût est donc augmenté. Avec 128 processeurs, le rapport de cadence diminue et le rapport de coût explose. Ainsi, pour une simulation sur $64^2 \times 128$ mailles, 16 est le nombre optimal de processeurs.

A.2.2 Comportement sur un maillage $128^2 \times 256$

La figure A.2(b) et la table A.1(b) exposent les courbes de comportement et données de calcul, explicitées précédemment, obtenues pour des simulations sur un maillage $128^2 \times 256$ avec différents nombres de processeurs [1, 8, 16, 64, 128]. De même que pour le maillage $64^2 \times 128$, le rapport de cadence se comporte de façon linéaire pour des calculs sur 1, 8 et 16 processeurs. Le rapport de coût est par contre quasi-constant (1,10 pour 16 processeurs). Pour 64 processeurs, le rapport de cadence est d'environ 30 pour un rapport de coût alors d'environ 2. Pour 128 processeurs, le rapport de cadence n'augmente pas par rapport à celui pour 64 processeurs, mais le rapport de coût augmente fortement. Ainsi si la rapidité est le critère principal, pour un maillage $128^2 \times 256$, le nombre de processeurs optimal est 64. Par contre si le coût en temps est le critère principal, le nombre de processeurs optimal sera 16.

A.2.3 Comportement sur un maillage $256^2 \times 512$

La figure A.2(c) et la table A.1(c) exposent les courbes de comportement et données de calcul, explicitées précédemment, obtenues pour des simulations sur un maillage $256^2 \times 512$ avec différents nombres de processeurs [1, 8, 16, 64, 128]. Pour le rapport de cadence, le code se comporte de façon quasi-linéaire pour toute la gamme de processeurs, avec une pente légèrement inférieure à 1. Le rapport de coût, quant à lui, augmente légèrement. Sa valeur pour 64 et 128 processeurs est quasiment la même ; ainsi on choisira 128 processeurs si l'on veut un calcul rapide et 16 processeurs si l'on veut un calcul peu dépensier en temps.

A.2.4 Conclusion

Le code numérique développé pour ce projet semble ainsi avoir un comportement des plus classiques vis-à-vis de la parallélisation. Pour la gamme de maillage étudiée ici, 16 est le nombre optimal de processeurs à prendre pour avoir une simulation assez rapide à faible coût. Si le coût n'est pas un problème, le nombre optimal de processeurs augmente logiquement avec le nombre de mailles.

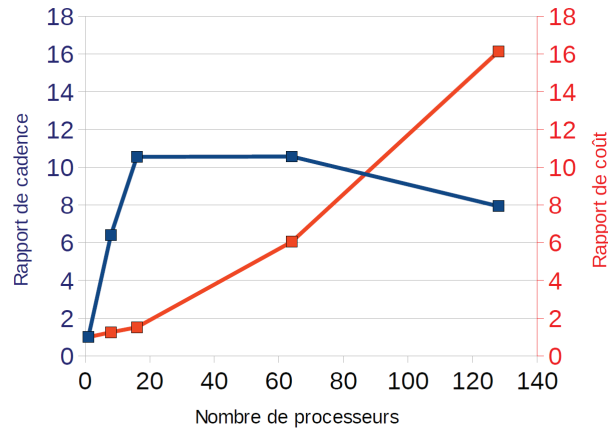
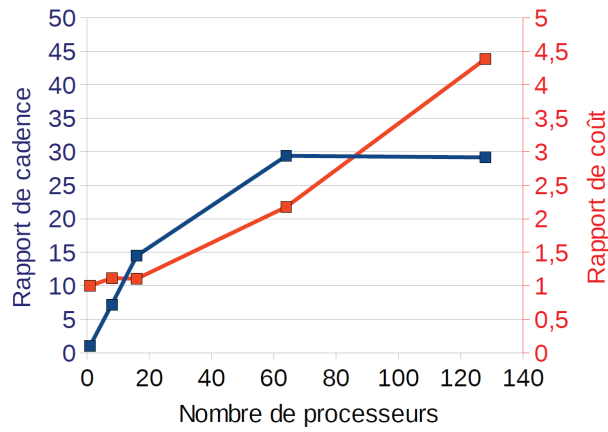
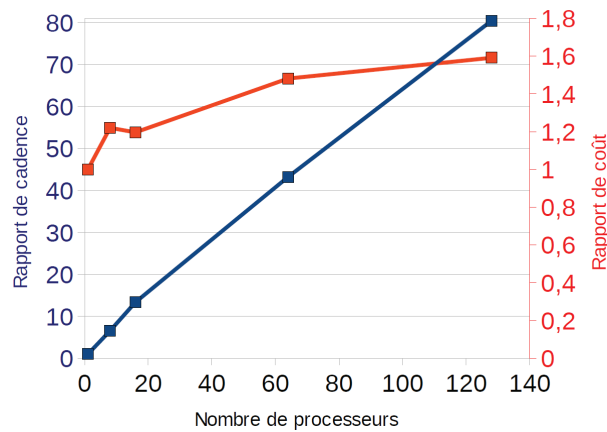
(a) Calcul $64^2 \times 128$ (b) Calcul $128^2 \times 256$ (c) Calcul $256^2 \times 512$

FIG. A.2 – Comportement $R_t(R_m)$ du code pour un calcul parallèle de : (a) $64^2 \times 128$ mailles, (b) $128^2 \times 256$ mailles, (c) $256^2 \times 512$ mailles. En bleu : rapport de cadence (*Speedup*). En rouge : rapport de coût.

(a) Calcul $64^2 \times 128$

N_{proc}	T_{proc}	S_p	C_{tot}	R_c
1	1,665 s	1	1,67 s	1
8	0,232 s	7,2	1,85 s	1,11
16	0,115 s	14,5	1,84 s	1,10
64	0,056 s	29,4	3,63 s	2,18
128	0,057 s	29,2	7,31 s	4,39

(b) Calcul $128^2 \times 256$

N_{proc}	T_{proc}	S_p	C_{tot}	R_c
1	1,665 s	1	1,67 s	1
8	0,232 s	7,2	1,85 s	1,11
16	0,115 s	14,5	1,84 s	1,10
64	0,056 s	29,4	3,63 s	2,18
128	0,057 s	29,2	7,31 s	4,39

(c) Calcul $256^2 \times 512$

N_{proc}	T_{proc}	S_p	C_{tot}	R_c
1	31,8 s	1	31,8 s	1
8	38,8 s	6,6	4,85 s	1,22
16	38,0 s	13,4	2,38 s	1,20
64	47,1 s	43,2	0,73 s	1,48
128	50,6 s	80,4	0,40 s	1,59

TAB. A.2 – Comportement du code pour un calcul parallèle sur 1, 8, 16, 64 ou 128 processeurs pour des simulations : (a) $64^2 \times 128$, (b) $128^2 \times 256$, et (c) $256^2 \times 512$.

Cimetière des méthodes de détection de structure

Cette annexe présente les différentes méthodes de détection de structures développées durant ce projet, mais qui n'ont pas abouti. Cette démarche a permis de mettre en avant l'importance de l'effet de mémoire et d'une définition systématique du seuillage entre les structures de façon à reconstituer les structures au centre de la zone de mélange. Ces méthodes sont présentées dans l'ordre chronologique de façon à mettre en avant l'évolution de nos idées sur la définition d'une structure turbulente au sein d'une IRT. Chaque méthode peut cependant être retravaillée au cas où certaines informations nous auraient échappées.

Toutes les méthodes de détection présentées ici utilisent une forme classique d'équation d'évolution d'un traceur passif de la forme :

$$\partial_t b^\pm + u_i b_{,i}^\pm = \Phi_{i,i}^\pm + S^\pm, \quad (\text{B.1})$$

où $b^\pm$ sont les champs de structures binaires et complémentaires ($b^\pm = 0$ ou 1 , et $b^+ + b^- = 1$), u_i le champ de vitesse locale, et $\Phi_i^\pm$ et $S^\pm$ sont respectivement des termes de diffusion et source à déterminer. Les versions diffèrent alors sur le choix de $\Phi_i^\pm$ et $S^\pm$.

Une autre idée principale est l'utilisation du champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε pour la modélisation de la turbulence. Ce choix n'est pas anodin : en vue de généraliser la détection de structures à tout type de mélange, il est important de travailler sur un champ le plus universel possible. Le champ ε est le meilleur candidat car il représente la turbulence aux petites échelles qui est présente dans toute sorte d'écoulement.

B.1 Version 1

La première version a été proposée en 2005 par Llor. Le choix de $\Phi_i^\pm$ et $S^\pm$ est fait sur une analyse rapide de dimensionnement :

- $\partial_i \Phi_i^\pm$ représente la diffusion de l'interface de $b^\pm$ entre 0 et 1. Nous l'estimons équivalente à une diffusion moléculaire qui suit une loi de Fick :

$$\Phi_i^\pm = \nu_b b_{,i}^\pm, \quad (\text{B.2})$$

où ν_b est la viscosité cinématique de $b^\pm$. Nous voulons que cette diffusion soit pilotée par la dissipation réelle ε du système sur une largeur caractéristique δ , a priori plus petite que l'échelle intégrale et proportionnelle à celle-ci. En utilisant la relation de Kolmogorov, cela donne alors :

$$\nu_b = (\varepsilon \delta^4)^{1/3}. \quad (\text{B.3})$$

- $S^\pm$ représente le terme de raidissement (ou de relaxation) de l'interface de $b^\pm$. En dehors de la zone inter-faciale, il force donc $b^\pm$ à garder la valeur 0 ou 1. $S^\pm$ peut être considéré comme un terme d'anti-diffusion qui restreint l'interface sur la largeur δ et autour de la valeur moyenne $1/2$ de $b^\pm$. Nous proposons :

$$S^\pm = R \, 8 b^+ b^- (b^\pm - 1/2). \quad (\text{B.4})$$

L'approche de Kolmogorov de la cascade inertielle donne alors pour avoir la bonne dimension :

$$R = (\varepsilon \delta^{-2})^{1/3} . \quad (\text{B.5})$$

Ces termes sont trouvés par une approche dimensionnelle, nous les ajustons donc avec un coefficient de temps de réponse σ .

Les champs de structures b^+ et b^- sont respectivement initialisés suivant les champs de fraction volumique des fluides $c^{m=2}$ et $c^{m=1}$:

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z) . \quad (\text{B.6})$$

Finalement, l'équation de traceur passif pour détecter $b^\pm$ se met sous la forme :

$$\partial_t b^\pm + u_i b_{,i}^\pm = \left(\sigma \varepsilon^{1/3} \delta^{4/3} b_{,i}^\pm \right)_{,i} + \sigma \varepsilon^{1/3} \delta^{-2/3} 8 b^+ b^- (b^\pm - 1/2) , \quad (\text{B.7a})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z) , \quad (\text{B.7b})$$

où

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- δ la largeur de l'interface de $b^\pm$ fixée par l'utilisateur.
- σ le coefficient de temps de réponse.

Une étude de perturbation autour de la réponse stationnaire de l'équation donne $\sigma = 1/3$.

Résultats : les résultats ne sont pas probants. En effet, le terme de raidissement est trop rapide pour que le terme de diffusion puisse jouer son rôle. L'interface de $b^\pm$ ne diffuse alors pas assez pour pouvoir suivre les bords de bulles.

B.2 Version 2

Afin de permettre à $b^\pm$ de diffuser assez rapidement pour pouvoir « accrocher » les bords de bulles et ne pas se laisser distancer, le terme de diffusion $\Phi_i^\pm$ a été décomposé en deux termes : un lent associé à la diffusion de l'interface $b_{,ii}$ et un rapide associé au suivi des bords de bulles par détection de gradient de turbulence $(\varepsilon_{,i}^{1/3}) b_{,i}^\pm$. Ce dernier terme représente alors une nouvelle forme d'advection de l'interface par la présence de la turbulence. La rapidité de réponse des termes est ajustée respectivement par deux coefficients de temps de réponse σ_s (pour *slow*) et σ_f (pour *fast*) :

$$\left(\sigma \varepsilon^{1/3} \delta^{4/3} b_{,i}^\pm \right)_{,i} \Rightarrow \sigma_s \delta^{4/3} \varepsilon^{1/3} b_{,ii}^\pm + \sigma_f \delta^{4/3} (\varepsilon^{1/3})_{,i} b_{,i}^\pm , \quad (\text{B.8})$$

avec $\sigma_f > \sigma_s$. De plus, pour lier le plus possible l'équation à la physique du mélange turbulent, nous utilisons les termes caractéristiques du mélange turbulent.

L'équation de détection devient alors :

$$\partial_t b^\pm + u_i b_{,i}^\pm = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 b_{,ii}^\pm + \sigma_f (r l_0)^{4/3} (\varepsilon^{1/3})_{,i} b_{,i}^\pm + \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 8 b^+ b^- (b^\pm - 1/2) , \quad (\text{B.9a})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z) . \quad (\text{B.9b})$$

où

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,

- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- σ_s et σ_f les coefficients de réponse respectivement lent et rapide.

Résultats : la détection n'est pas améliorée par rapport à la version 1. L'intermittence aux petites échelles de la dissipation ε rend le terme d'advection par la turbulence $(\varepsilon^{1/3})_{,i} b_{,i}^\pm$ négligeable par rapport à l'advection par la matière u_i .

B.3 Version 3

Le problème d'intermittence de la dissipation due à la turbulence est mis en avant. Une équation de filtrage temporel de ε est introduite. L'intermittence ainsi minimisée, l'interface de $b^\pm$ doit être continument advectée par les zones turbulentes. Nous filtrons la « pression turbulente de structure » $\kappa \sim \varepsilon/\omega_0$ pour ainsi modéliser les « forces d'advection par la turbulence ».

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = -\omega_0 \kappa + \varepsilon, \quad (\text{B.10a})$$

$$\partial_t b^\pm + u_i b_{,i}^\pm = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 b_{,ii}^\pm + \sigma_f r^{4/3} (l_0 \sqrt{\kappa})_{,i} b_{,i}^\pm + \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 8b^+ b^- (b^\pm - 1/2), \quad (\text{B.10b})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z). \quad (\text{B.10c})$$

où

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- $\kappa(t, x, y, z)$ est la pression turbulente de structure locale, filtrage temporel de ε/ω_0 .

Résultats : le filtrage de la turbulence minimise les fluctuations du champ d'advection par la turbulence. Cependant la détection n'est pas améliorée. Les effets d'intermittence sont aussi présents dans le champ d'advection de la matière u_i , ce qui a aussi un impact sur l'interface de $b^\pm$.

B.4 Version 4

Deux équations de filtrage sont utilisées respectivement pour les champs de vitesses de la matière et de pression turbulente de structure. Le champ de structures est alors advecté par ces deux champs

filtrés.

$$\partial_t \tilde{u}_i + u_i \tilde{u}_{i,i} = -\omega_0 (\tilde{u}_i - u_i) , \quad (\text{B.11a})$$

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = -\omega_0 \kappa + \varepsilon , \quad (\text{B.11b})$$

$$\partial_t b^\pm + \tilde{u}_i b_{,i}^\pm = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 b_{,ii}^\pm + \sigma_f r^{4/3} (l_0 \sqrt{\kappa})_{,i} b_{,i}^\pm + \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 8b^+ b^- (b^\pm - 1/2) , \quad (\text{B.11c})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z). \quad (\text{B.11d})$$

où :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- $\kappa(t, x, y, z)$ la pression turbulente de structure local, filtrage temporel de ε/ω_0 ,
- $\tilde{u}_i(t, x, y, z)$ le champ filtré des vitesses de fluide locales u_i .

Résultats : les champs filtrés rendent bien compte de la présence de structures dans le mélange et donnent donc une bonne information de la position de l'interface de $b^\pm$. Cependant l'équation de détection ne donne pas les résultats escomptés. Le champ filtré de la vitesse ne permet pas une advection assez rapide de $b^\pm$ par rapport à l'advection réelle de la matière. De plus, le raidissement de $b^\pm$ autour de sa valeur $1/2$ ne permet pas de positionner l'interface au bon endroit, le champ de structures n'englobe alors pas assez le fluide turbulent présent dans les bulles et les aiguilles du mélange.

B.5 Versions 5 et 6

Deux équations de filtrage (versions 5/6 : sans/avec termes de diffusion) sont utilisées pour le champ respectivement de vitesses locales et de pression turbulente de structure. Une fonction limiteur est introduite afin de raidir l'interface de $b^\pm$ autour de 0 ou de 1 afin de bien englober le fluide turbulent. Le champ de vitesse filtrée est normalisé de façon à corriger l'impact du filtrage sur la valeur de $\tilde{u}_i$.

$$\partial_t \tilde{u}_i + u_i \tilde{u}_{i,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \tilde{u}_{i,jj} - \omega_0 (\tilde{u}_i - u_i) , \quad (\text{B.12a})$$

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \kappa_{,ii} - \omega_0 \kappa + \varepsilon , \quad (\text{B.12b})$$

$$\begin{aligned} \partial_t b^\pm + \frac{U_i^M}{\overline{U}_i^M} \tilde{u}_i b_{,i}^\pm &= \sigma_s r^{4/3} \nu_0 b_{,ii}^\pm + \sigma_f r^{4/3} (l_0 \sqrt{\kappa})_{,i} b_{,i}^\pm \\ &\quad + \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 8b^+ b^- (b^\pm - \mathcal{L}(\sigma_f r^{4/3} \kappa_{,i} b_{,i}^\pm / \omega_0)) , \end{aligned} \quad (\text{B.12c})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^{m\pm}(0, x, y, z) . \quad (\text{B.12d})$$

avec les termes suivants :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,

- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- $\kappa(t, x, y, z)$ la pression turbulente de structure local, filtrage temporel de ε/ω_0 ,
- $\tilde{u}_i(t, x, y, z)$ le champ filtré des vitesses de fluide locales u_i ,
- $U_i^M(t)$ et $\tilde{U}_i^M(t)$ sont les maxima 0D respectivement de u_i et $\tilde{u}_i$.
- $\mathcal{L}$ une fonction limiteur telle que $\mathcal{L}(x) \sim 1/2$ quand $x \sim 0$, $\mathcal{L}(x) \sim 0$ quand $x \sim +\infty$ et $\mathcal{L}(x) \sim 1$ quand $x \sim -\infty$, comme par exemple :

$$\mathcal{L}(x) = 1/2(1 + \tanh(x)) , \quad (\text{B.13})$$

$$\mathcal{L}(x) = 1/2(1 + \text{erf}(x)) . \quad (\text{B.14})$$

Résultats : La fonction $\mathcal{L}$ ne permet pas de bien englober les structures et le champ filtré normalisé n'adecte pas parfaitement bien $b^\pm$. Un travail d'ajustement plus fin pourrait peut-être améliorer les résultats.

B.6 Version 7

Une équation de filtrage temporel est utilisée pour le champ de pression turbulente de structure. Nous utilisons l'équation d'évolution d'un traceur χ symétrique par rapport 0 pour pouvoir utiliser son signe pour la fonction limiteur de raidissement.

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \kappa_{,ii} - \omega_0 \kappa + \varepsilon , \quad (\text{B.15a})$$

$$\partial_t \chi + u_i \chi_{,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \chi_{,ii} + \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 (1 - \chi^2)(\chi - \chi_b) , \quad (\text{B.15b})$$

$$\chi_b = -\text{sign}(\chi) \sqrt{\frac{\zeta}{1 + \zeta}} \quad \text{avec} \quad \zeta = \frac{\kappa^2}{\kappa_0^2} , \quad (\text{B.15c})$$

$$\chi(0, x, y, z) = c^2(0, x, y, z) - c^1(0, x, y, z) , \quad (\text{B.15d})$$

$$b^\pm = (1 \pm \chi)/2 . \quad (\text{B.15e})$$

avec les termes suivants :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- $\kappa(t, x, y, z)$ la pression turbulente de structure local, filtrage temporel de ε/ω_0 ,

- $\kappa_0(t)$ la pression turbulente de structure 0D,
- $\hat{u}_i$ le champ filtré du champ de vitesse de fluide locale u_i .
- $\chi(t, x, y, z)$ le champ scalaire suivant l'équation d'évolution,
- $\chi_b(t, x, y, z)$ une fonction limiteur dépendant du signe de χ et de la turbulence.

Résultats : le champ de structures obtenu n'est pas concluant. À l'interface, le signe de χ passe de $-$ à $+$, l'interface est alors à la fois raidie autour -1 et autour de $+1$.

B.7 Version 7bis

On utilise le champ de vitesse verticale pour déterminer la valeur de référence du terme de raidissement. Un bon ajustement du temps de réponse du terme de raidissement permet en fait d'obtenir une largeur d'interface voulue sans avoir recours à un terme de diffusion supplémentaire.

$$\partial_t \chi + u_i \chi_{,i} = C_r r^{-2/3} \omega_0 (1 - \chi^2) (\chi - \chi_b) , \quad (\text{B.16a})$$

$$\chi_b = -\text{sign}(u_z) , \quad (\text{B.16b})$$

$$\chi(0, x, y, z) = c^2(0, x, y, z) - c^1(0, x, y, z) , \quad (\text{B.16c})$$

$$b^\pm = (1 \pm \chi)/2 \quad (\text{B.16d})$$

avec les termes suivants :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\chi(t, x, y, z)$ le champ scalaire suivant l'équation d'évolution,
- $\chi_b(t, x, y, z)$ est une fonction limiteur dépendant du signe de u_z ,
- C_r est un coefficient de raidissement à ajuster en fonction du temps de réponse et de la largeur d'interface voulus.

Résultats : la détection donne un champ de structures en accord avec les champs de vitesse et densité d'un point de vue topologique. Les profils de moyenne conditionnée de la fraction volumique, densité et vitesse sont équivalents à ceux du modèle 2SFK.

Cette méthode ne remplit cependant pas de façon explicite nos critères de détection de structures. En effet, χ_b représente un seuil entre $b^\pm$, et celui-ci utilise le champ instantané u_z . Comme nous l'avons vu (voir chapitre 4), ce champ ne remplit pas le critère de bimodalité. C'est en fait le couplage entre le seuillage et le filtrage via le terme de raidissement qui donne un suivi correct des structures. On peut alors obtenir *a posteriori* une bonne bimodalité au centre de la zone de mélange. Le contrôle de la méthode pour obtenir cette bimodalité est cependant compliqué car il nécessite un travail itératif d'analyse des résultats pour ajuster les coefficients.

Ainsi, il est important de comprendre le couplage complexe qui apparait dans le terme de raidissement si l'on veut être certain de bien remplir nos critères de détection.

B.8 Version 8

On utilise un terme inspiré de l'équation de Cahn-Hilliard pour modéliser les phénomènes d'advection à l'échelle de l'interface de $b^\pm$. En effet, celle-ci peut être assimilée à une transition de phase. Le terme de Cahn-Hilliard est placé avec le champ de vitesse de fluide u_i car il est inclus comme

vitesse d'advection dans notre méthode numérique de type décentrement à droite (*upwind*).

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \kappa_{,ii} - \omega_0 \kappa + \varepsilon, \quad (\text{B.17a})$$

$$\partial_t b^\pm + (u_i + \omega_0^{-1/3} (\kappa_{,j} \kappa_{,j})_{,i}) b_{,i}^\pm = \sigma_s r^{-2/3} \omega_0 8 b^+ b^- (b^\pm - 1/2), \quad (\text{B.17b})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^m(0, x, y, z). \quad (\text{B.17c})$$

avec les termes suivants :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $r = \delta/l_0$ le rapport d'échelle entre la largeur de l'interface de $b^\pm$ et l'échelle intégrale, défini entre 0,1 et 0,2,
- $\kappa(t, x, y, z)$ est la pression turbulente de structure local, filtrage temporel de ε/ω_0 ,

Résultats : le terme de Cahn-Hilliard advection l'interface là où l'on passe d'une zone turbulente à une zone laminaire. C'est un terme rapide qui doit corriger la position de l'interface au cas où l'interface se trouve dans une zone turbulente. Cela nécessite alors d'avoir une condition CFL très petite afin de laisser le temps au terme de faire la correction avant que la matière ne se déplace à nouveau. La simulation est alors très coûteuse en temps pour un résultat qui n'est pas aussi bon que celui de la version 7bis.

B.9 Version 9

On introduit un taux de relaxation variable ($\omega_0 - \sqrt{\kappa}/l_0$) pour le terme de raidissement. Ainsi pour les zones de fortes turbulences, l'interface reste diffuse et l'ambiguïté de l'attribution du fluide à une structure + ou – disparaît dans l'interface. Le terme $(b^\pm - 1/2)^3$ permet de réduire le raidissement aux interfaces.

$$\partial_t \kappa + u_i \kappa_{,i} = \sigma_s r^{4/3} \nu_0 \kappa_{,ii} - \omega_0 \kappa + \varepsilon \quad (\text{B.18a})$$

$$\partial_t b^\pm + u_i b_{,i}^\pm = C_d (\sqrt{\kappa} l_0 b_{,i}^\pm)_{,i} + (\omega_0 - C_r \sqrt{\kappa}/l_0) 16 b^+ b^- (b^\pm - 1/2)^3 \quad (\text{B.18b})$$

$$b^\pm(0, x, y, z) = c^{m^\pm}(0, x, y, z). \quad (\text{B.18c})$$

avec les termes suivants :

- $b^\pm(t, x, y, z)$ sont les champs de structures tels que $b^+ + b^- = 1$,
- $c^m(t, x, y, z)$ les champs de fractions volumique de fluide lourd $m = 2$ et léger $m = 1$,
- $\varepsilon(t, x, y, z)$ le champ de dissipation de l'énergie cinétique turbulente,
- $\varepsilon_0(t)$ la dissipation 0D de l'énergie cinétique turbulente,
- $k_0(t)$ l'énergie cinétique turbulente 0D,
- $\nu_0(t) = k_0^2/\varepsilon_0$ la viscosité turbulente 0D,
- $\omega_0(t) = \varepsilon_0/k_0$ la fréquence de rotation turbulente 0D,
- $l_0(t) = k_0^{3/2}/\varepsilon_0$ l'échelle intégrale 0D,
- $\kappa(t, x, y, z)$ est la pression turbulente de structure local, filtrage temporel de ε/ω_0 ,

- C_d et C_r sont des coefficients à ajuster.

Résultats : Bien que le terme $(b^\pm - 1/2)^3$ permette réduire le raidissement de l'interface et donc de prendre en compte plus de turbulence, l'advection par la turbulence n'est pas assez forte. La valeur $1/2$ a aussi un effet négatif sur la détection.

Bilan statistique des équations moyennées conditionnées

Nous présentons ici, le bilan statistique des différentes équations moyennes conditionnées 5.6 et réarrangées suivant :

$$\partial_t(\alpha^\pm) = -(\alpha^\pm U_i^\pm)_{,i} - \Phi_{i,i}^{\alpha^\pm} \mp \Psi^\alpha - \overline{b^\pm(\phi_i^1/\rho_1 + \phi_i^2/\rho_2)}_{,i}, \quad (\text{C.1a})$$

$$\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm C^{m\pm}) = -(\alpha^\pm \rho^\pm C^{m\pm} U_i^\pm)_{,i} - \Phi_{i,i}^{m\pm} \mp \Psi^m - (\overline{b^\pm \phi_i^m})_{,i} + \overline{b_{,i}^\pm \phi_i^m}, \quad (\text{C.1b})$$

$$\left[\partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm) = -(\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm)_{,i} + \mp \Psi^\rho \right], \quad (\text{C.1c})$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm) = & -(\alpha^\pm \rho^\pm U_i^\pm U_j^\pm)_{,j} - R_{ij,j}^\pm \mp \Psi_i^u - \alpha^\pm P_{,i} \mp (\alpha^+ \alpha^- \delta P)_{,i} \mp D_i \\ & + \alpha^\pm \rho^\pm g_i + (\overline{b^\pm \tau_{ij}})_{,j} - \overline{b_{,j}^\pm \tau_{ij}}, \end{aligned} \quad (\text{C.1d})$$

$$\begin{aligned} \partial_t(\alpha^\pm \rho^\pm K^\pm) = & -(\alpha^\pm \rho^\pm K^\pm U_i^\pm)_{,i} - \Phi_{i,i}^{k\pm} \mp \Psi^{k\pm} - R_{ij}^\pm U_{i,j}^\pm - \Phi_i^{\alpha^\pm} P_{,i} \\ & - \Phi_{i,i}^{p\pm} + \Pi^{d\pm} + \Theta^{p\pm} + (\overline{b^\pm \tau_{ij}(u_i - U_i^\pm)})_{,j} \\ & - \overline{b_{,j}^\pm \tau_{ij}(u_i - U_i^\pm)} - \overline{b^\pm \tau_{ij}(u_{i,j} - U_{i,j}^\pm)}, \end{aligned} \quad (\text{C.1e})$$

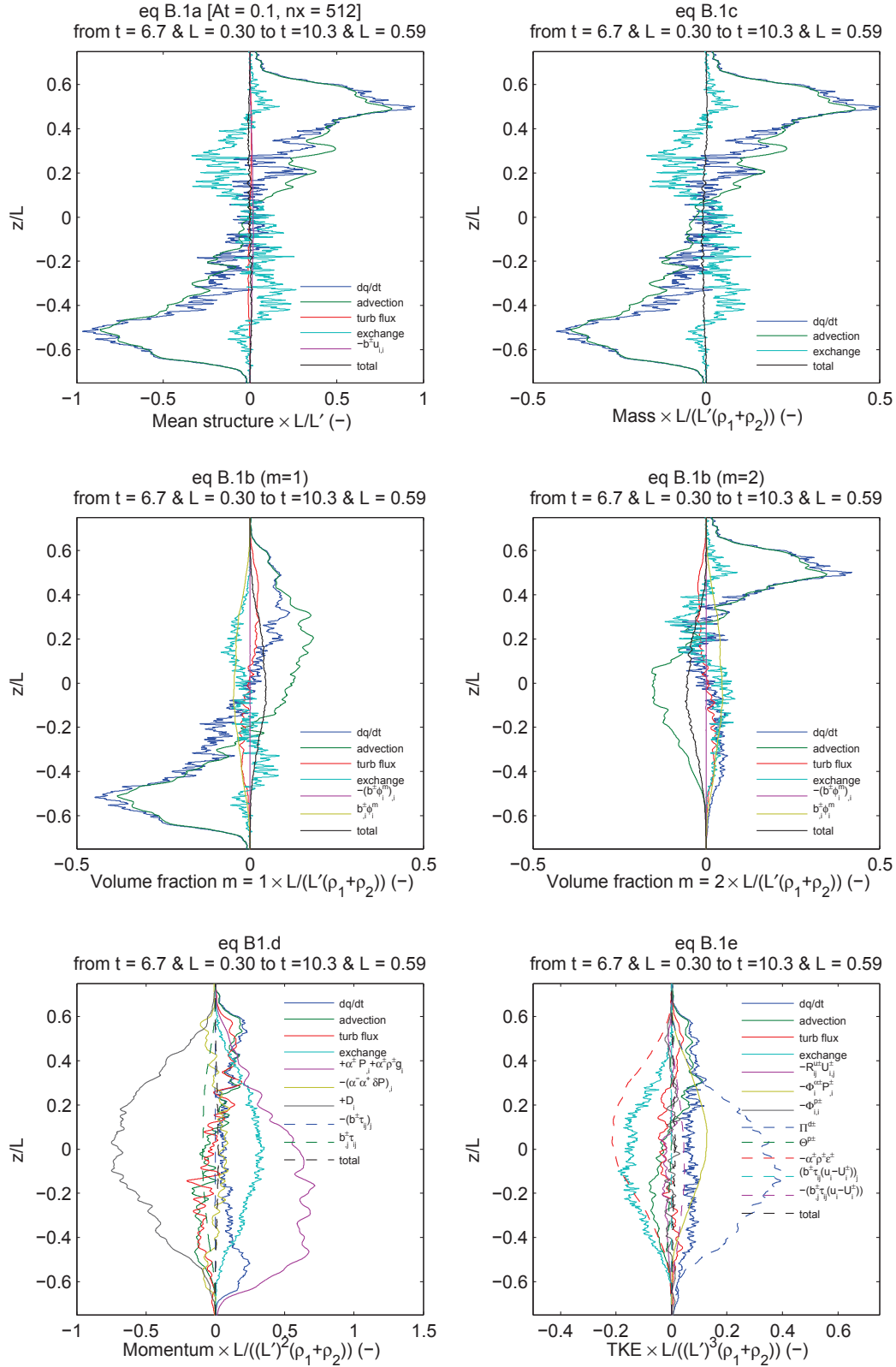
Nous avons ainsi à gauche la variation de la quantité q étudiée et à droite les différents termes qui contribuent à cette variation.

Les figures C.1, C.2 et C.3 montrent le bilan statistique des équations C.1⁻, C.1⁺ et C.1⁻ + C.1⁺ respectivement dans le champ de structures montantes b^- , descendantes b^+ , et dans tout le mélange $b^+ + b^- = 1$ correspondant à l'approche mono-fluide. Les termes de droite sont affichés avec le signe placé devant dans l'équation, de cette façon il est possible de voir directement quels termes contribuent à augmenter ou diminuer q . Sur toutes les figures, nous désignons par :

- « advection » : le terme d'advection $(qU^\pm)_{,i}$ de la quantité q ,
- « turb flux » : le terme de flux turbulent $-\Phi_{i,i}^q$ ou $-R_{ij,j}^\pm$ de la quantité q ,
- « exchange » : le terme d'échange $\mp \Psi^q$ de la quantité q .
- « total » : la somme de tous les termes de gauche et de droite de l'équation,

les autres termes sont directement indiqués sur la figure. Le total permet de vérifier que le bilan de chaque équation est exact. Le résultat doit être égal à 0, et le résidu quantifie alors l'impact des résidus numériques sur les corrélations.

Les figures présentées ici ont été faites grâce aux routines MATLAB de post-traitement développées par John Redford.

FIG. C.1 – Bilan statistique des équations d'évolution dans le champ de structures montantes b^- .

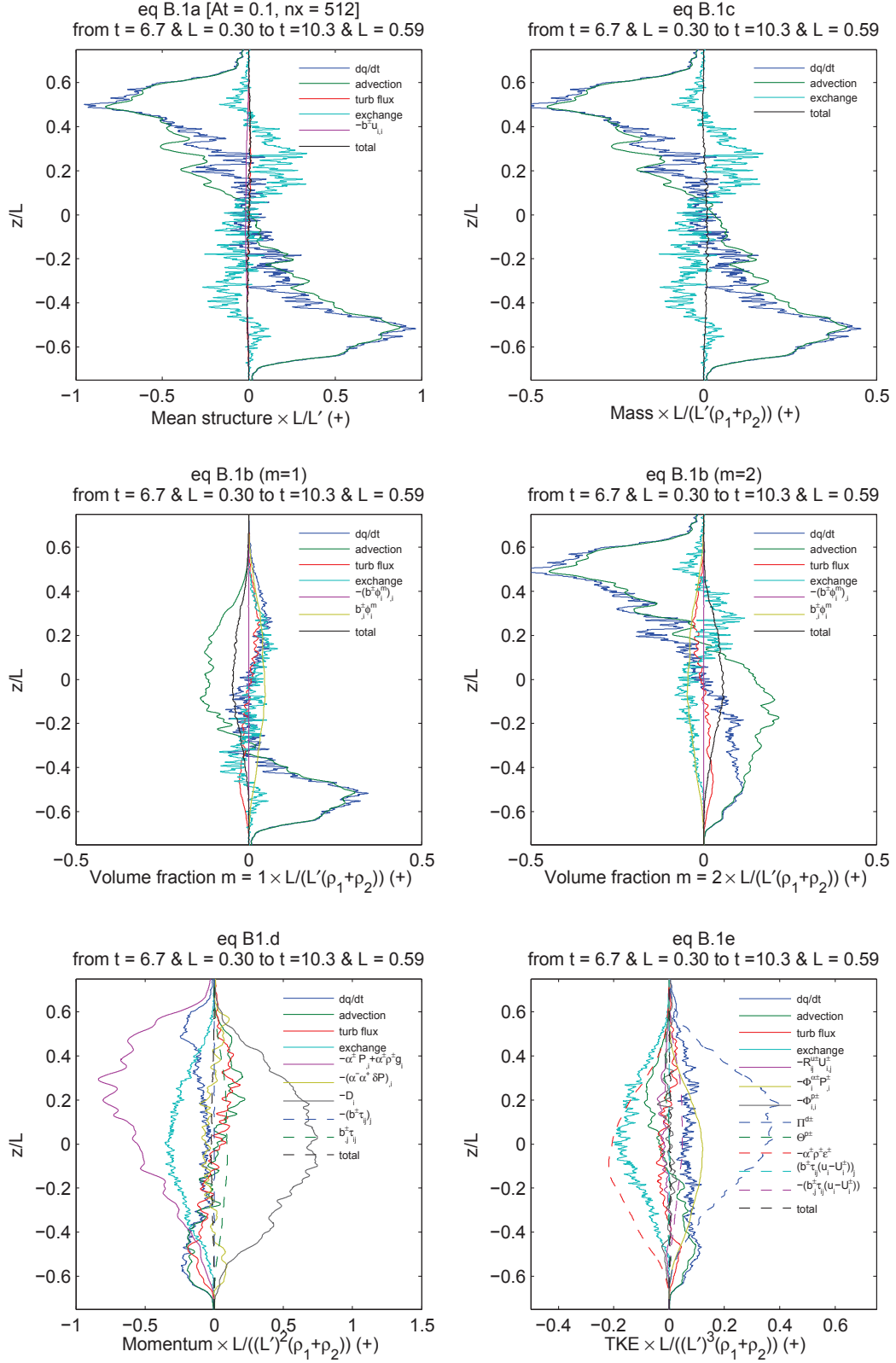


FIG. C.2 – Bilan statistique des équations d'évolution dans le champ de structures descendantes b^+ . Attention, les structures ont une vitesse verticale négative. La trainée est donc positive.

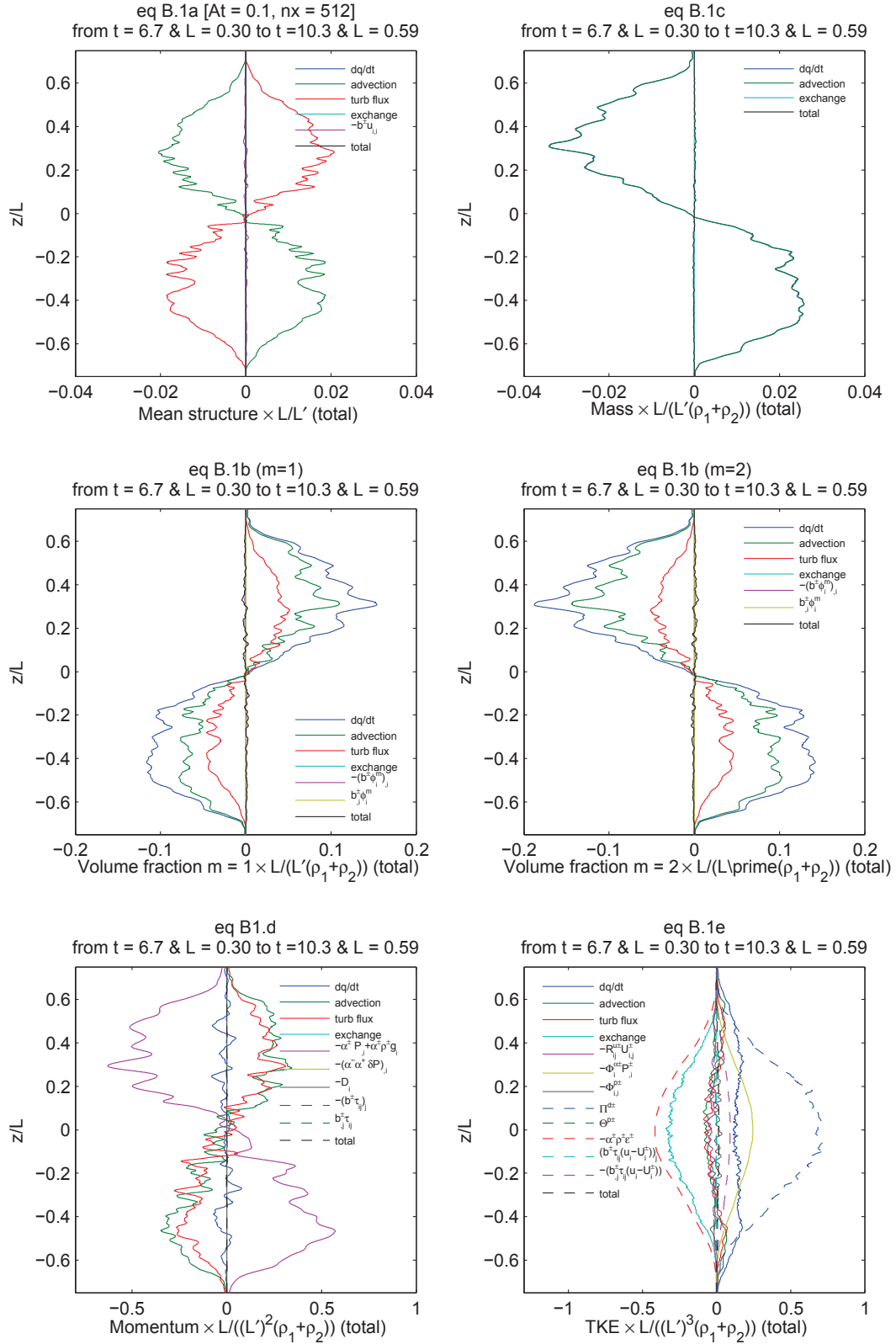


FIG. C.3 – Bilan statistique des équations d'évolution dans la boîte de calcul au total.

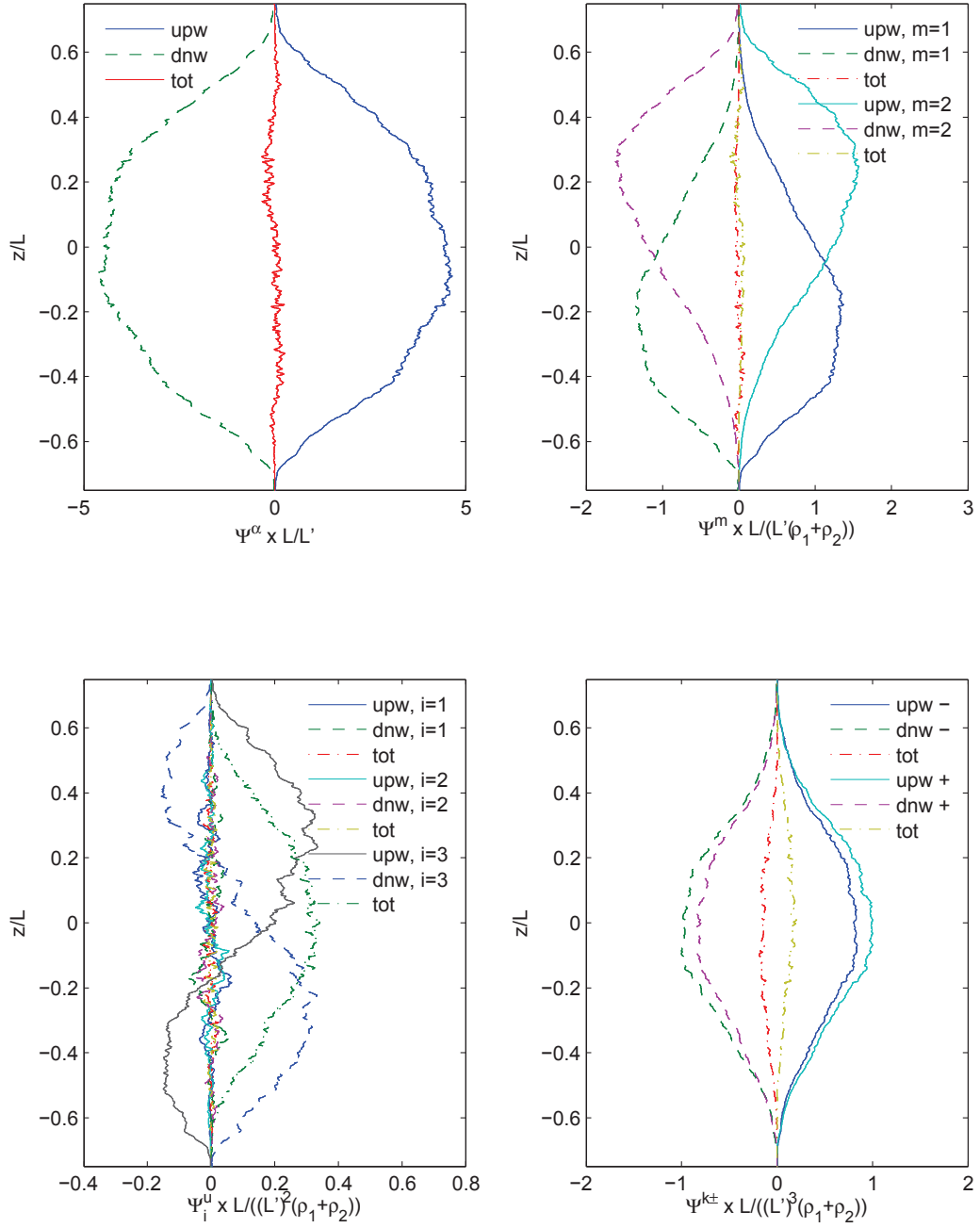


FIG. C.4 – Bilan statistique des termes d'échanges.

Table des figures

1.1	Ombroscopie d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. Expérience de Dimonte et Schneider (reproduit de [Dimonte 1996]). La gravité est dirigée du fluide de densité ρ_2 (bas) vers le fluide de densité $\rho_1 < \rho_2$ (haut). En raison de perturbations à l'interface, il se produit alors le mélange turbulent.	2
1.2	Cartes de densité et de vitesse d'une IRT. Ici la gravité est dirigée vers le bas. La ligne noire délimite une entité de transport montante et met en avant sa densité hétérogène dans le cas miscible (code TURMOIL3D) comme dans le cas immiscible (code ALEGRAIR). Reproduit de [Dimonte 2004].	5
1.3	Ombroscopie d'une couche de mélange cisailé entre de l'hélium (haut) et de l'azote (bas) pour différents nombre de Reynolds. Du plus turbulent (a) au moins turbulent (e). Reproduit de [Brown 1974]. L'écoulement cisailé se structure à grande échelle sous forme de vortex, et cela même à grand nombre de Reynolds.	6
1.4	Représentation schématique de la zone de mélange turbulent pour une gravité dirigée vers le bas ; ligne pointillée : frontière de structure ; niveau de gris : niveau de fraction massique de fluide. Les structures descendantes sont appelées structures + et les structures montantes, structures -. Ces structures présentent une composition variable en fluides 1 et 2 : pures dans les zones laminaires et mélangées dans les bulles et aiguilles. Reproduit de [Llor 2003b].	8
2.1	Maille élémentaire de type décentré MAC utilisée dans le code TURMIX3D. Les quantités volumiques (densité ρ et pression p) sont au centre et les quantités de flux (vitesses u, v, w) sont aux faces de la maille.	13
2.2	Schéma décentré d'ordre 1 pour le calcul de la densité. On récupère toujours l'information en amont du point de vitesse considéré.	17
2.3	Schéma décentré d'ordre 2 pour le calcul de la densité. On récupère toujours l'information en amont du point de vitesse considéré en prenant aussi en compte les variations de densité amont.	17
2.4	Volumes élémentaires d'intégration pour la méthode de volumes finis utilisée : en noir la maille élémentaire centrée sur les quantités de volume ρ et p . En bleu, vert et rouge les volumes d'intégration respectivement de $u_1 = u$, $u_2 = v$ et $u_3 = w$. Par souci de clarté, ne sont affichées que les normales $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_3$ et $\mathbf{n}_5$ des volumes respectivement rouge, bleu et vert.	19
2.5	Parallélisation 3D de la boîte de calcul pour $(NP_x, NP_y, NP_z) = (4, 4, 4)$. Chaque sous-cube représente alors le domaine de calcul d'un processeur.	23
2.6	Dispositif initial du test d'advection d'une sphère. La sphère se déplace suivant la direction $(x, y, z) = (1, 1, 1)$ à une vitesse $\vec{V}$ constante.	24
2.7	Carte de densité de la section diagonale de la boîte de calcul. On retrouve en rouge la section de la sphère présentée en figure 2.6.	24
2.8	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Le limiteur SuperBee est le moins diffusif et garde l'interface de bulle sur environ 6 mailles, par contre il donne une sphéricité assez détériorée.	25

2.9	Contours de fractions volumiques $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.8.	26
2.10	Isosurfaces de fraction volumique $c = 0, 5$ obtenues après l'advection de la sphère d'une dizaine de noeuds - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. On voit bien ici la perte de sphéricité avec le limiteur SuperBee précédemment exposée en figures 2.8 et 2.9.	26
2.11	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. La sphère a quasiment disparu à l'ordre 1 dû à une trop grande viscosité numérique. Seul le limiteur SuperBee assure une interface constante sur environ 6 mailles.	27
2.12	Contours de fraction volumique $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.11.	28
2.13	Isosurfaces de fraction volumique $c = 0, 5$ obtenues après l'advection de la sphère de deux traversées complètes de la boîte - a) Ordre 1, b) SuperBee, c) MinMod, d) VanLeer. On confirme les remarques exposées en figure 2.11 et 2.12. On voit aussi la détérioration flagrante de la sphéricité avec le limiteur SuperBee.	28
2.14	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. La méthode de splitting assure une bonne sphéricité mais génère par contre une viscosité numérique anisotrope le long de la direction d'advection.	29
2.15	Contours de fraction volumique $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.14.	29
2.16	Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0, 5$ obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte : a) Non-splitté, b) Splitté. On voit que bien que la méthode de splitting atténue le manque de sphéricité exposé en figures 2.14 et 2.15, elle ne l'annule pas complètement pour autant et transforme la sphère en ovale.	30
2.17	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . À partir du maillage 64^3 , le limiteur SuperBee arrive à contrecarrer la viscosité numérique et garder l'interface sur un nombre constant de mailles.	31
2.18	Contours de fraction volumique $c = 0, 1, 0, 5$ et $0, 9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . Les contours confirment les remarques exposées en figure 2.17.	31
2.19	Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0, 5$ après l'advection de la sphère de deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et pour différents maillages : a) 16^3 , b) 32^3 , c) 64^3 , d) 128^3 . On confirme les remarques exposées en figures 2.17 et 2.18 et on peut aussi voir l'évolution de la sphère en dodécaèdre dû à l'action du limiteur.	32
2.20	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenues après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. Le limiteur est efficace pour toute la gamme de CFL.	32

2.21	Contours de fraction volumique $c = 0,1, 0,5$ et $0,9$ de la section diagonale de la boîte de calcul obtenus après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. Le limiteur est efficace pour toute la gamme de CFL comme vu en figure 2.20.	33
2.22	Isosurfaces de fraction volumique de $c = 0,5$ obtenus après deux passages complets de la boîte en utilisant le limiteur SuperBee et différentes conditions CFL : a) CFL=0,1 ; b) CFL=0,25 ; c) CFL=0,50 ; d) CFL=0,75. On confirme les remarques exposées en figures 2.20 et 2.21.	33
2.23	Cartes de densité de la section diagonale de la boîte de calcul obtenus après deux passages complets en utilisant le limiteur SuperBee et avec deux conditions CFL : a) CFL=0,99 ; b) CFL=1,00. Pour une valeur de CFL de 0,99 le schéma converge malgré les oscillations présentes. Pour une valeur de CFL de 1,00, le schéma diverge et ne permet plus l'advection de la sphère.	34
2.24	Carte en niveaux de couleurs de la densité, à l'ordre 1 à gauche et à l'ordre 2 avec limiteur SuperBee à droite, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D de (a) $32^2 \times 64$, (b) $64^2 \times 128$, (c) $128^2 \times 256$ et (d) $256^2 \times 512$ mailles. L'utilisation de limiteur permet d'obtenir un niveau de détail supérieur à celui de l'ordre 1. Le niveau de détail obtenu avec les limiteurs sur un maillage $128^2 \times 256$ est même supérieur au niveau de détail obtenu avec l'ordre 1 sur un maillage $256^2 \times 512$	35
2.25	Évolutions de (a) la taille L de la zone de mélange, et de (b) sa dérivée temporelle, aux ordres 1 et 2 avec limiteur SuperBee pour quatre tailles de maille différentes $h = 1/32, 1/64, 1/128, 1/256$	35
2.26	Évolution et erreur relative de L pour une simulation monomode $32^2 \times 64$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la taille de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Ainsi, le code converge à l'ordre 1,5.	37
2.27	Évolution et erreur relative de L pour une simulation monomode $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Comme vu en figure 2.26, le code semble converger à l'ordre 1,5.	38
2.28	Évolution et erreur relative de L pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5, on peut toutefois remarquer une faible amélioration en passant de CFL=0,25 à CFL=0,1.	40
2.29	Évolution et erreur relative de K_p pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5, on peut toutefois remarquer une faible amélioration en passant de CFL=0,25 à CFL=0,1.	41
2.30	Évolution et erreur relative de K_t pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5.	42
2.31	Évolution et erreur relative de E pour une simulation de mélange turbulent $64^2 \times 128$ et pour différentes valeurs de CFL. (a) Évolution de la zone de mélange, (b) Erreur relative. Le code semble converger à l'ordre 1,5.	43
3.1	Isosurfaces de fraction volumique $c = 0.5$ d'une simulation monomode pour trois nombres d'Atwood différents $A=0,1, 0,5$ et $0,9$, (a) publiées [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006], et (b) obtenues avec nos résultats. On calcule l'isosurface lorsque la taille de bulle h_b est égale à $h_b = 0,8\lambda$, où λ est le diamètre de la bulle. Pour les trois nombres d'Atwood, l'aspect de nos résultats est quasiment identique à ceux déjà publiés.	46

3.2	Évolutions de la taille de bulle h_b , et de sa vitesse h'_b , d'une simulation monomode avec un nombre d'Awood de $A = 0,5$, (a) publiées [Ramaprabhu 2005, Ramaprabhu 2006], et obtenues avec (b) nos résultats. Nous obtenons la même vitesse terminale. La deuxième variation de vitesse dans notre cas est dû à une seconde instabilité de Kelvin-Helmholtz qui se développe.	47
3.3	Représentation du taux de croissance Γ dans le champ de vecteur d'onde (k_x, k_y) . En plein maillé : $\Gamma_{\text{Euler}}^{\text{num}}(k_x, k_y)$ - En transparent : $\Gamma_{\text{Euler}} = \sqrt{Ag\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}$. Δ est la longueur de maille. Nos résultats dénotent une évolution plus lente des différents modes présents dans la perturbation initiale, ce qui implique la présence d'une viscosité numérique.	48
3.4	Représentation du taux de croissance dans le champ de vecteurs d'onde (k_x, k_y) . En plein : $\Gamma_{\text{num}}(k_x, k_y)$ - En transparent : $\Gamma(\omega = 0.2)$. Δ est la longueur de maille. Les surfaces sont presque identiques, nous pouvons ainsi quantifier la viscosité totale du code lors de la phase linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor.	49
3.5	Comparaison des Γ suivant $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ trouvés par notre code (rouge vif) et par l' α -group (reproduit de [Dimonte 2004]). Notre code se comporte de la même façon que le code RTI-3D (jaune), code qui se trouve être le plus proche du nôtre en matière de modélisation et de méthodes numériques.	50
3.6	Évolution de la viscosité du code numérique. La viscosité totale du code converge vers une valeur proche de celle de viscosité physique donnée.	51
3.7	Évolutions du coefficient de croissance α et du nombre de Reynolds Re : (a) publiées 3072 ³ [Cabot 2006], et (b) nos résultats 256 ³ . Notre maillage étant moins résolu, nous n'avons pas le même nombre de Reynolds, mais nous avons le même comportement ainsi que le même coefficient de croissance.	52
3.8	Évolution des énergies normalisées par la taille de bulle dans le mélange : (a) publiés 3072 ³ [Cabot 2006], et (b) nos résultats 256 ³ . Entre $t/\tau = 0$ et 15, le bilan de production et dissipation d'énergie est le même pour les deux simulations.	53
3.9	Spectres d'énergie de la densité ρ et des vitesses u , v et w : (a) publiés 3072 ³ [Cabot 2006], et (b) nos résultats pour une simulation de 256 ³ mailles. Les deux résultats affichent une cascade inertielle due à la turbulence jusqu'à une échelle de coupure due à la dissipation. Nos résultats sont cependant moins dissipatifs car les spectres d'énergie chutent moins que pour ceux de Cabot et Cook.	53
3.10	Évolution du nombre de Reynolds :	56
3.11	Spectre d'énergie E suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-même, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec cependant une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation.	56
3.12	Pour chaque triplet d'images et de gauche à droite, production Π , transfert $\mathcal{T}$ et dissipation $\mathcal{E}$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation, comme mentionnée en figure 3.11.	57

3.13	Pour chaque doublet d'images et de gauche à droite, transferts par convection $\mathcal{T}_c$ et par variation de pression $\mathcal{T}_p$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec une échelle de dissipation plus petite pour notre simulation, comme mentionnée en figures 3.11 et 3.12.	58
3.14	Pour chaque doublet d'images et de gauche à droite, transfert par dilatation $\mathcal{T}_c$ suivant z (ordonnée) et $\log_{10}(k)$ (abscisse) obtenus par (a) Cook et Zhou [Cook 2002], (b) et par nous-mêmes, aux temps $t = 3$ (haut-gauche), $t = 4$ (bas-gauche), $t = 5$ (haut-droit), $t = 6$ (bas-droit). Les résultats sont équivalents avec toujours la même remarque mentionnée en figures 3.11, 3.12 et 3.13.	59
3.15	Évolutions des différents transferts et variations d'énergie. Les points noirs représentent les différentes phases de l'évolution de la bulle exposée en figure 3.16. On peut voir au moment de la formation de la deuxième instabilité de Kelvin-Helmholtz, formant les tourbillons de part et d'autre de la bulle, que les transferts d'énergie aux modes supérieurs à 1 augmentent fortement, générant une diminution de l'énergie cinétique de la bulle de mode 1.	60
3.16	Cartes en niveau de couleurs de la densité sur la section diagonale de la boîte de calcul pour 6 temps différents. Les différentes étapes exposées ici sont représentées par des points noirs sur la figure 3.15 du bilan de transfert d'énergie.	60
4.1	Carte en niveaux de couleurs de la densité ρ dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D. La gravité étant dirigée vers le bas et des perturbations étant présentes à l'interface, le fluide dit lourd de densité ρ_2 se mélange avec le fluide dit léger de densité $\rho_1 < \rho_2$	64
4.2	Schématisation des structures turbulentes, identifiées ici visuellement par leurs contrastes de densité et de vitesse verticale. Chaque courbe de couleur représente une structure turbulente présente dans la zone de mélange. Zone de mélange reproduit de [Dimonte 2004].	64
4.3	Schématisation des différentes structures cohérentes à trouver avec notre approche, la méthode de Hussain basée sur la vorticit��, et la m��thode de Lumley bas��e sur l'��nergie des modes pr��sents dans le m��lange.	68
4.4	En prenant pour $\alpha^\pm$ des profils lin��aires compl��mentaires, nous trouvons les profils 1D qualitatifs suivant z des vitesses verticales $U_z^\pm$ des structures $\pm$	69
4.5	Profils suivant z des vitesses verticales $U^\pm$, densit�� $\rho^\pm$, ��nergies cin��tiques turbulentes $k^\pm$ et dissipations de l'��nergie cin��tique turbulente $\varepsilon^\pm$ dans les structures $\pm$. Le contraste pr��sent dans chaque quantit�� et g��n��r�� par la gravit�� permet de faire une d��tection bi-structure du m��lange.	70
4.6	Valeurs du coefficient de bimodalit�� β pour diff��rentes distributions rencontr��es lors de nos analyses. Au dessus de $\beta \approx 2$, la distribution ne peut plus ��tre consid��r��e comme bimodale.	71
4.7	Cartes en niveau de couleurs dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D du champ de densit�� aux temps (a) $t_1 = 2,2$ (en unit��s de $\sqrt{H/g}$) lorsque le m��lange est laminaire, et (b) $t_2 = 5,2$ lorsque le m��lange est turbulent.	77
4.8	Cartes en niveaux de couleurs, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t_1 = 2,2$ (en unit��s de $\sqrt{H/g}$), du champ utilis�� pour la d��tection (premi��re colonne) et du champ de structures b^+ obtenus (deuxi��me colonne) avec $\{(a),(b)\} u'$, $\{(c),(d)\} \rho'$, $\{(e),(f)\} \tilde{u}'$, $\{(g),(h)\} \tilde{\rho}'$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont d��finis en 4.5.	78

4.9	Cartes en niveaux de couleurs, dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), du champ utilisé pour la détection (première colonne) et du champ de structures b^+ obtenus (deuxième colonne) avec $\{(a),(b)\}$ u' , $\{(c),(d)\}$ ρ' , $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5.	79
4.10	Fonctions de distribution suivant z/L aux temps (en unités de $\sqrt{H/g}$) $t_1 = 2,2$ (première colonne) et $t_2 = 5,2$ (deuxième colonne) de $\{(a),(b)\}$ u'/L' , $\{(c),(d)\}$ $\rho'/(\rho_2 - \rho_1)$, $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'/L'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'/(\rho_2 - \rho_1)$. En magenta les courbes des seuils associés. L'échelle de couleur des cartes est ajustée de façon à obtenir du bleu pour $p = 0$ et du rouge pour $p_{\max} = \max_{\phi_s} p(\phi_s, z = 0)$. Les champs $\tilde{u}'$ et $\tilde{\rho}'$ sont définis en 4.5.	80
4.11	Profils des coefficients de bimodalité β suivant z/L aux temps (en unités de $\sqrt{H/g}$) $t_1 = 2,2$ (première colonne) et $t_2 = 5,2$ (deuxième colonne) de $\{(a),(b)\}$ u'/L' , $\{(c),(d)\}$ $\rho'/(\rho_2 - \rho_1)$, $\{(e),(f)\}$ $\tilde{u}'/L'$, $\{(g),(h)\}$ $\tilde{\rho}'/(\rho_2 - \rho_1)$. En pointillé, la valeur 2,0 d'une distribution sans bimodalité. Les champs u' et ρ' sont définis en 4.5. Rappels en bleu sur (e) à (h) des courbes respectivement en (a) à (d) pour visualiser l'effet du filtrage.	81
4.12	Profils des coefficients d'ajustement optimaux C_Φ des fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$ suivant z/L . Le profil parabolique dans la zone de mélange permet de prendre en compte la variation d'intensité de la turbulence entre les bords et le milieu de la zone de mélange.	87
4.13	Profils des coefficients d'ajustement optimaux C_Φ des fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$ suivant z/L . Du fait du comportement différent de la densité ρ par rapport aux fluctuations de vitesse verticale u' , les valeurs des coefficients sont différents, donnant ainsi des profils C_Φ différents que ceux exposés sur la figure 4.12.	89
4.14	Fractions volumiques α^+ et α^2 du champ de structures b^+ et du fluide lourd 2 au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.	93
4.15	Densité totale ρ et par champs de structures $\rho^\pm$ au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.	94
4.16	Vitesses verticales totales U_z et par champs de structures $U_z^\pm$ au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenues avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, et (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenues avec (e) le modèle 2SFK.	95
4.17	Différents termes d'énergie au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) obtenus avec les méthodes de détection utilisant le champ (a) de fluctuations de vitesse verticale u' , (b) de fluctuations de densité ρ' , (c) de fluctuations de vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, et (d) de fluctuations de densité filtrées $\tilde{\rho}'$, et obtenus avec (e) le modèle 2SFK.	96
4.18	Termes de travail de la traînée (en rouge), production par échange de turbulence (en bleu) et production de Rayleigh–Taylor intra-structure (en vert) obtenues au temps $t_2 = 5,2$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) avec les fluctuations de (a) la vitesse verticale instantanées, (b) la densité instantanées, (c) la vitesse verticale filtrées, (d) la densité filtrées.	97

5.1	Caractéristiques importantes d'une instabilité de Rayleigh–Taylor au temps $t = 10,3$ (en unités de $\sqrt{H/g}$) : (a) coefficient de croissance et nombre de Reynolds, (b) bilan d'énergie, et (c) spectre d'énergie des champs physiques. Ces résultats peuvent être comparés à ceux obtenus pour une simulation 256^3 et exposées figures 3.7, 3.8 et 3.9.	102
5.2	Cartes en niveaux de couleurs dans la section diagonale de la boîte de calcul 3D au temps $t = 10,3$ (en unités de $\sqrt{H/g}$), pour les champs de (a) densité ρ , (b) vitesse verticale instantanée u_z , (c) fluctuations de la vitesse verticale filtrées $\tilde{u}'$, (d) présence de structures b^+ construit avec $\tilde{u}'$, (e) et la fonction de distribution $p(\tilde{u}'/L', z/L)$, ainsi que (f) le profil de bimodalité $\beta^u(z)$. Ces résultats peuvent être comparés à ceux exposés sur les figures 4.8 à 4.11.	104
5.3	Évolution de l'aire inter-faciale A_{int} suivant L . La faible convergence de la courbe pourrait s'expliquer par la présence d'une phase transitoire qui empêche d'obtenir une réelle auto-similarité du mélange et/ou par le comportement fractal de l'interface dû aux fluctuations non-filtrées du champ de vitesse.	105
5.4	Évolution des coefficients de mélange mono-fluide Θ_m et bi-structure Θ_b . La différence entre les deux courbes vient de l'hypothèse de mélange homogène dans les structures par le modèle 2SFK, donnant un mélange plus fort que dans la simulation numérique.	106
5.5	Profils suivant z/L des fractions volumiques du fluide lourd α^2 et du champ de structures b^+ obtenues (a) par SND et (b) par 2SFK, densités du fluide $\bar{\rho}$, et dans les champs de structures $\rho^\pm$ obtenues (c) par SND et (d) par 2SFK, vitesses verticales du fluide U_z , et dans les champs de structures $U_z^\pm$ obtenues (e) par SND et (f) par 2SFK.	107
5.6	Profils suivant z/L des flux turbulents de volume $\Phi_i^\pm$. Les résultats obtenus par simulation sont deux fois plus faibles que ceux obtenus avec le modèle 2SFK, ce qui explique les différences perçues sur les profils $U^\pm$ exposés en figure 5.5.	108
5.7	Profils du terme d'échange de volume inter-structures Ψ^α suivant z/L obtenus par SND et 2SFK. Le comportement obtenu par SND est inverse à celui obtenu par le modèle 2SFK.	109
5.8	Profils des termes d'échanges de volume inter-structures Ψ^α , de perte de volume de la structure $+ b_{i,i}^+(w_i - u_i) $, et de gain de volume de la structure $+ b_{i,i}^+(w_i - u_i) $ suivant z/L obtenus par SND.	109
5.9	Profils du terme d'échange de volume inter-structures Ψ^α au temps initial suivant z/L obtenu par SND et 2SFK. Le comportement obtenu par SND est inverse à celui obtenu par le modèle 2SFK.	110
5.10	Processus de transfert d'énergie pour les approches mono-fluide et bi-structure. L'approche bi-fluide ou bi-structure sépare le mélange en deux champs et met avant une vitesse de dérive δU_i et une énergie dirigée K_d centrale aux processus de production d'énergie cinétique turbulente.	111
5.11	Profils des énergies mono-fluide k , et bi-structure k_b , k_d et $k^\pm$ suivant z/L définis par les équations 5.27 et exposées sur le schéma de la figure 5.10 obtenus par (a) SND, (b) et 2SFK.	112
5.12	Profils des termes de production d'énergie turbulente mono-fluide $\overline{u''}P_i$, $R_{ij}U_{i,j}$ et bi-structure $(\Phi_i^+ + \Phi_i^-)P_i$, $R_{ij}^+U_{i,j}^+ + R_{ij}^-U_{i,j}^-$, $\alpha^+\alpha^-(\rho^- - \rho^+)/\rho\delta U_i$, $-\Psi^{k+} + \Psi^{k-}$ et $\Pi^{d+} + \Pi^{d-}$ définis par les équations 5.28 et exposé sur la figure 5.10, suivant z/L , obtenus par (a) SND, et (b) 2SFK.	114
A.1	Comportement en temps $R_t(R_m)$ du code pour un calcul : (a) séquentiel, (b) sur 16 processeurs, (c) sur 64 processeurs. En bleu : résultats numériques obtenus. En rouge : droite de pente 1 relatant un comportement linéaire et symétrique du code.	119

A.2	Comportement $R_t(R_m)$ du code pour un calcul parallèle de : (a) $64^2 \times 128$ mailles, (b) $128^2 \times 256$ mailles, (c) $256^2 \times 512$ mailles. En bleu : rapport de cadence (<i>Speedup</i>). En rouge : rapport de coût.	123
C.1	Bilan statistique des équations d'évolution dans le champ de structures montantes b^-	134
C.2	Bilan statistique des équations d'évolution dans le champ de structures descendantes b^+ . Attention, les structures ont une vitesse verticale négative. La trainée est donc positive.	135
C.3	Bilan statistique des équations d'évolution dans la boîte de calcul au total.	136
C.4	Bilan statistique des termes d'échanges.	137

Bibliographie

- [Allred 1953] J.C. Allred et Blount G.H. *Experimental studies of Taylor instability*. Rapport technique LA-1600, Los Alamos National Laboratory, 1953. 2
- [Andrews 1995] M. J. Andrews. *Accurate computation of convective transport in two-phase flow*. Int. J. Numer. Methods Fluids, vol. 21, no. 205, 1995. 49
- [Andronov 1976] V.A. Andronov et al. al. al. al. Zh. Eksp. Teor. Fiz., vol. 71, no. 806, 1976. 2
- [Aubry 1988] N. Aubry, P. Holmes, J.L. Lumley et S. Stone. *The dynamics of coherent structures in the wall region of a turbulent boundary layer*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 192, pages 115–173, 1988. 67
- [Banerjee 2006] A. Banerjee et M.J. Andrews. *Statistically steady measurements of Rayleigh-Taylor mixing in a gas channel*. Physics of Fluids, vol. 18, no. 3, 2006. 3
- [Barnes 2002] C. W. Barnes et al. *Observation of mix in a compressible plasma in a convergent cylindrical geometry*. Physics of plasmas, vol. 9, no. 11, pages 4431–4434, November 2002. 1
- [Birkoff 1955] G. Birkoff. *Taylor Instability and Laminar Mixing*. Rapport technique LA-1862, Los Alamos National Laboratory, 1955. 2
- [Boris 1992] J.P. Boris, F.F. Grinstein, E.S. Oran et R.L. Kolbe. *New insights into large eddy simulation*. Fluid Dyn. Res., vol. 10, pages 199–228, 1992. 22
- [Brandt 1982] A. Brandt. *Guide to Multigrid Development*. In Multigrid Methods, Berlin, 1982. Springer-Verlag. 9, 14
- [Bri 1987] A multigrid tutorial, SIAM, Philadelphia, 1987. 9, 14
- [Bridges 1989] J. Bridges, H. S. Husain et F. Hussain. *Whither coherent structures? Comment 1*. In Whither coherent structures? Turbulent at the crossroads, volume 357, pages 132–151. Springer, 1989. 65, 67
- [Broadwell 1986] J. E. Broadwell et P. E. Dimotakis. *Implications of recent experimental results for modeling reactions in turbulent flows*. AIAA J., vol. 24, no. 6, pages 885–888, 1986. 7
- [Brown 1969] J. A. Jr. Brown. *A Numerical Investigation of Hydrodynamic Instability and Energy Conversions in the Quasi-Geostrophic Atmosphere*. Journal of Atmospheric Sciences, vol. 26, no. 3, pages 366–375, 1969. 1
- [Brown 1971] G. Brown et A. Roshko. *The effect of density difference on the turbulent mixing layer*. In A.G.A.R.D. Conference on Turbulent Shear Flows, pages 23/1–23/12. NATA Advisory Group for Aerospace Research and Development, NATO Advisory Group for Aerospace Research and Development, 1971. 5
- [Brown 1974] G. Brown et A. Roshko. *On density effects and large structure in turbulent mixing layers*. Journal of Fluid Mechanics, no. 64, pages 775–816, 1974. 5, 6, 139
- [Cabot 2006] W.H. Cabot et A.W. Cook. *Reynolds number effects on Rayleigh-Taylor instability with possible implications for type-Ia supernovae*. Nature Physics, vol. 2, no. 8, pages 562–568, 2006. 1, 3, 9, 45, 51, 52, 53, 142
- [Cantwell 1989] B. Cantwell. *Future Directions in Turbulence Research and the Role of Organized Motion*. In Whither coherent structures? Turbulent at the crossroads, volume 357, pages 97–131. Springer, 1989. 6, 7
- [Chandrasekhar 1961] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamics and hydromagnetic stability*. Oxford Univ. Press, chap. x. édition, 1961. 2, 47, 49

- [Cook 1996] AW. Cook et J. J. Riley. *Direct Numerical Simulation of a Turbulence Reactive Plume on a Parallel Computer*. Journal of Computational Physics, no. 129, pages 263–283, 1996. 13
- [Cook 2002] AW. Cook et Y. Zhou. *Energy transfer in Rayleigh-Taylor instability*. Physical Review E, no. 66, 2002. 9, 45, 54, 56, 57, 58, 59, 142, 143
- [Dalziel 1999] SB. Dalziel, PF. Linden et DL. Youngs. *Self-similarity and internal structure of turbulence induced by Rayleigh-Taylor instability*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 399, pages 1–48, 1999. 3, 7
- [Dimonte 1996] G. Dimonte et M. Schneider. *Turbulent Rayleigh-Taylor instability experiments with variable acceleration*. Physical Review E, vol. 54, no. 4, pages 3740–3743, October 1996. 2, 139
- [Dimonte 2004] G. Dimonte et al. al. al. al. *A comparative study of the turbulent Rayleigh-Taylor instability using high-resolution three-dimensional numerical simulations : The Alpha-Group collaboration*. Physics of Fluids, vol. 16, no. 5, pages 1668–1693, 2004. 3, 4, 5, 9, 45, 49, 50, 64, 139, 142, 143
- [Do Khac 1998] M. Do Khac, C. Basdevant, T. Hiep-Le et K. Dang-Tran. *Topological and Dynamical Analysis of a Three-Dimensional Mixing-Layer*. Aerospace Science and Technology, no. 1, pages 13–26, 1998. 68
- [Eljack 2009] E. Eljack et T. Ohta. *Reconstruction of the Most Energetic Modes in a Fully Developed Turbulent Channel Flow with Density Variation*. International Journal of Signal Processing, vol. 5, no. 4, 2009. 67
- [Farge 1992] M. Farge. *Wavelets transforms and their applications to turbulence*. Annu. Rev. Fluid Mech., vol. 24, pages 395–457, 1992. 68
- [Gottlieb 2001] S. Gottlieb et al. *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*. SIAM Review, vol. 43, no. 1, pages 89–112, 2001. 19
- [Harten 1984] A. Harten. *On a class of high resolution total variation stable finite differences schemes*. SIAM Journal of Numerical Analysis, no. 21, pages 1–23, 1984. 15
- [Harten 1987] A. Harten, B. Engquist, S. Osher et S. Chakravarthy. *Uniformly high order essentially non-oscillatory schemes, III*. Journal of Computational Physics, no. 71, pages 231–303, 1987. Reprint : *Journal of Computational Physics*, no. 131, pages 3–47 (1997). 15
- [Holmes 1997] J.P. Holmes, J.L. Lumley, G. Berkooz, J.C. Mattingly et R.W. Wittenberg. *Low-dimensional models of coherent structures in turbulence*. Physics Reports, no. 287, pages 337–384, 1997. 7
- [Hussain 1981] F. Hussain. Proc. Indian Acad. Sci. (Eng. Sci.), vol. 4, no. 129, 1981. 67
- [Hussain 1983] F. Hussain. Phys. of Fluids, vol. 26, no. 2816, 1983. 67
- [Hussain 1986] F. Hussain. J. Fluid Mech., vol. 173, no. 303, 1986. 67
- [Kelvin 1871] Lord (William Thomson) Kelvin. *Hydrokinetic solutions and observations*. Philosophical Magazine, vol. 42, pages 362–377, 1871. 1
- [Lafaurie 1994] B. Lafaurie et al. *Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER*. J. Comput. Phys., no. 113, 1994. 11, 14, 22
- [Laney 2006] D. Laney et al. *Understanding the Structure of the Turbulent Mixing Layer in Hydrodynamic Instabilities*. IEEE Transactions on visualization and computer graphics, vol. 12, no. 5, pages 1053–1060, September/October 2006. 67
- [Lewis 1950] D.J. Lewis. Proc. R. Soc. London, vol. Ser. A202, no. 81, 1950. 2
- [Liepmann 1952] HW. Liepmann. *Aspects of the turbulence problem, Part II*. ZAMP Zeit. ang. Math. Phys., vol. 3, no. 5, pages 321–342, 1952. 5

- [Linden 1994] P.F. Linden, J.M. Redondo et D.L. Youngs. *Molecular mixing in Rayleigh-Taylor instability*. Journal of Fluid Mechanics, vol. 265, pages 97–124, 1994. 4
- [Liu 1988] J.T.C. Liu. *Contributions to the understanding of large-scale coherent structures in developing free turbulent shear flows*. Adv. Appl. Mech., no. 26, pages 183–309, 1988. 6
- [Llor 2003a] A. Llor. *Bulk turbulent transport and structure in Rayleigh–Taylor, Richtmyer–Meshkov, and variable acceleration instabilities*. Laser and Particle beams, no. 21, pages 305–310, 2003. 4, 69
- [Llor 2003b] A. Llor et P. Bailly. *A new turbulent two-field concept for modeling Rayleigh–Taylor, Richtmyer–Meshkov and Kelvin–Helmholtz mixing layers*. Laser and particle beams, vol. 21, no. 03, pages 311–315, April 2003. 7, 8, 63, 116, 139
- [Llor 2004] A. Llor, P. Bailly et O. Poujade. *Volume fraction profiles of transport structures in Rayleigh–Taylor turbulent mixing zone : evidence of enhanced diffusion processes*. In 9th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing, July 2004. 106
- [Llor 2005] A. Llor. Statistical hydrodynamics models for developed mixing instability flows. Lecture Notes in Physics, Springer, 2005. 3, 116
- [Llor 2010] A. Llor, N. Lardjane et O. Poujade. *2SFk : A two-field RANS model for turbulent flows with density contrasts ; application to Rayleigh–Taylor type instabilities*. In 8th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, 2010. 63
- [Lumley 1967] J.L. Lumley. *The structure of inhomogeneous turbulence*. In Yaglom, A.M., Tatarski, V.I. (Eds), Atmospheric Turbulence and Wave Propagation, pages 166–178, Nauka, Moscow, 1967. 5, 67
- [Lumley 1981] J.L. Lumley. Coherent structures in turbulence in transition and turbulence. Academic Press, 2nd edition, 1981. 6
- [Lumley 1989] J.L. Lumley. *Whither Turbulence ? Turbulence at the Crossroads : Proceedings of a Workshop Held at Cornell University*. J. L. Lumley, Lecture Notes in Physics, vol. 357, 1989. 6, 65
- [Lumley 2001] J.L. Lumley et A.M. Yaglom. *A Century of Turbulence*. Flow, Turbulence and Combustion, no. 66, pages 241–286, 2001. 3, 7
- [Meshkov 1969] E. E. Meshkov. Izv. Acad. Sci. USSR Fluid Dynamics, vol. 4, no. 101, 1969. 1
- [Meyer 1991] Y. Meyer et T. Paul. *Wavelets and Applications*. In Proceedings of the Second International Wavelet Conference, Marseille, June 1989, 1991. Paris : Masson. In Press. 68
- [Moffatt 1990] H. K. Moffatt. Topological fluid mechanics, volume 805. Cambridge Univ. Press., 1990. 7
- [Moreau 2006] J. Moreau et A. Liné. *Proper Orthogonal Decomposition for the Study of Hydrodynamics in a Mixing Tank*. American Institute of Chemical Engineers Journal, vol. 52, no. 7, July 2006. 67
- [Morlet 1983] J. Morlet. *Issues on Acoustic Signal / Image Processing and Recognition*, 1983. 68
- [Nicoud 1998] F. C. Nicoud. *Numerical study of a channel flow with variable properties*. In Annual Research Briefs. Center for Turbulence Research, 1998. 13
- [Nicoud 2000] F. C. Nicoud. *Conservative High-Order Finite-Difference Schemes for Low-Mach Number Flows*. Journal of Computational Physics, no. 158, pages 71–97, 2000. 13
- [Otsu 1979] N. Otsu. *A threshold selection method from gray-level histograms*. IEEE Trans. Sys. Man. Cyber., vol. 9, pages 62–66, 1979. 72
- [Peyret 1983] R. Peyret et T. D. Taylor. Computational methods for fluid flow. Springer-Verlag, New York/Berlin, 1983. 9, 12, 13, 15

- [Pope 2000] Stephen B. Pope. *Turbulent flows*. The press syndicate of the university of Cambridge, Melbourne, Australia, cambridge university press édition, 2000. 21, 22
- [Press 1991] W. H. Press et S. A. Teukolsky. *Comput. Phys.*, no. 514, Sep/Oct 1991. 9, 14
- [Ramaprabhu 2005] P. Ramaprabhu et G. Dimonte. *Single-mode dynamics of the Rayleigh-Taylor instability at any density ratio*. *Physical Review E*, no. 71, 2005. 7, 9, 45, 46, 47, 141, 142
- [Ramaprabhu 2006] P. Ramaprabhu et G. Dimonte. *Limits of the potential flow approach to the single-mode Rayleigh-Taylor problem*. *Physical Review E*, no. 74, 2006. 9, 45, 46, 47, 141, 142
- [Rayleigh 1883] J.W.S Lord Rayleigh. *Investigation of the Character of the Equilibrium of an Incompressible Heavy Fluid of Variable Density*. *Proc. London Math. Soc.*, vol. 14, pages 170–177, 1883. 1, 47
- [Read 1984] KI. Read. *Experimental investigation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability*. *Physica D*, vol. 12, no. 1-3, pages 45–58, 1984. 1, 2
- [Regan 2002] S. P. Regan et al. *Phys. Rev. Lett.*, no. 89, 2002. 1
- [Rempfer 1994] D. Rempfer. *On the structure of dynamical systems describing the evolution of coherent structures in a convective boundary layer*. *Physics of Fluids*, vol. 6, no. 3, March 1994. 67
- [Reynolds 1895] O. Reynolds. *On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion*. *Philos. Trans. Roy. Soc. Ser.*, vol. A 186, pages 123–164, 1895. 3
- [Richtmyer 1960] R.D. Richtmyer. *Comm. Pure and Appl. Math.*, no. 13, page 297, 1960. 1
- [Rosenfeld 1982] A. Rosenfeld et A.C. Kak. *Digital picture processing*. Academic Press, New York, 1982. 67
- [Sharp 1984] D. H. Sharp. *An overview of Rayleigh-Taylor instability*. *Physica 12D : Nonlinear Phenomena*, vol. Volume 12, no. Issue 1-3, pages p. 3–18, 1984. 1, 2
- [Shih 1987] T.-H. Shih, J.L. Lumley et J. Janicka. *Second order modelling of a variable density mixing layer*. *J. Fluid Mech.*, no. 180, pages 93–116, 1987. 7
- [Taylor 1950] G. Taylor. *The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes*. *Proc. Roy. Soc. London Ser.*, vol. A201, pages 192–196, 1950. 1
- [Townsend 1956] A. A. Townsend. *The structure of turbulent shear flow*. Cambridge Univ. Press., 1st ed. édition, 1956. 5
- [Van Leer 1973] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. I. The Quest of Monotonicity*. In *Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics*, numéro 18, pages 163–168. Springer-Verlag, 1973. 17
- [Van Leer 1974] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme*. *Journal of Computational Physics*, no. 14, pages 361–370, 1974. 17
- [Van Leer 1977a] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. III. Upstream-Centered Finite Difference Schemes for Ideal Compressible Flow*. *Journal of Computational Physics*, no. 23, pages 263–275, 1977. 17
- [Van Leer 1977b] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. IV. A new approach to numerical convection*. *Journal of Computational Physics*, no. 23, pages 276–299, 1977. 17
- [Van Leer 1979] B. Van Leer. *Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A second order sequel to Godunov's method*. *Journal of Computational Physics*, no. 32, pages 101–136, 1979. 17

- [von Helmholtz 1868] Hermann Ludwig Ferdinand von Helmholtz. *On the discontinuous movements of fluids*. Monthly Reports of the Royal Prussian Academy of Philosophy, vol. 23, page 215, 1868. 1
- [Yih 1960] C.-S. Yih. J. Fluid Mech., vol. 9, no. 68, 1960. 54
- [Youngs 1984] DL. Youngs. *Numerical-Simulation of Turbulent Mixing by Rayleigh-Taylor Instability*. Physica D, vol. 12, no. 1-3, pages 32–44, 1984. 1, 2, 4
- [Youngs 1991] DL. Youngs. *Three-dimensional numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh-Taylor instability*. Physics of Fluids, vol. 3, no. 5, pages 1312–1320, May 1991. 3
- [Youngs 1992] DL. Youngs. *Rayleigh-Taylor instability : numerical simulation and experiment*. Plasma Physics and Controlled Fusion, vol. 34, no. 13, pages 2071–2076, 1992. 1
- [Youngs 1994] DL. Youngs. *Numerical simulation of mixing by Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instabilities*. Laser and particle beams, vol. 12, no. 4, pages 725–750, 1994. 3, 4
- [Youngs 1996] DL. Youngs. *Representation of the Molecular Mixing Process in a Two-Phase Flow Turbulent Mixing Model*. In Proceedings of the Fifth International Workshop on Compressible Turbulent Mixing. R. Young, J. Glimm & B. Boston, 1996. 4, 7, 116