

Simulation numérique des écoulements turbulents dans les canaux de refroidissements : application aux moteurs-fusées

David Taieb

► To cite this version:

David Taieb. Simulation numérique des écoulements turbulents dans les canaux de refroidissements : application aux moteurs-fusées. Autre. INSA de Rouen, 2010. Français. NNT : 2010ISAM0033 . tel-00925522

HAL Id: tel-00925522 https://theses.hal.science/tel-00925522v1

Submitted on 8 Jan 2014

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.











THÈSE

présentée par

David TAÏEB

Pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline :	Énergétique
Spécialité :	Mécanique des Fluides
Formation doctorale :	Sciences Physiques, Mathématiques
	et de l'Information pour l'Ingénieur
Laboratoire d'accueil :	CORIA UMR-6614

Simulation numérique des écoulements turbulents dans les canaux de refroidissement. Application aux moteurs-fusées.

soutenue le 7 décembre 2010

Membres du jury :

Rapporteurs :	
Françoise Bataille	Professeur, PROMES - Université de Perpignan
Bénédicte Cuenot	Chercheur Sénior, CERFACS (Toulouse)
Examinateurs :	
Marc Buffat	Professeur, Université Claude Bernard Lyon I
Abdellah Hadjadj	Professeur, INSA de Rouen (directeur de thèse)
Julien Reveillon	Professeur, Université de Rouen
Guillaume Ribert	Maître de conférences, INSA de Rouen (co-encadrant)
Sandrine Palerm	Ingénieur, CNES (Evry)
Didier Saucereau	Ingénieur, Snecma division moteurs spatiaux (Vernon)

Résumé

Cette thèse traite par simulation numérique les écoulements turbulents compressibles avec transferts de chaleur, en relation avec les applications moteurs-fusées. Elle concerne, plus particulièrement, les systèmes de refroidissement des chambres de combustion. Le fluide refroidissant circule dans un état supercritique (haute pression et basse température) dans des canaux millimétriques, entourant la chambre de combustion. Ces problèmes font appel à une physique assez complexe et mettent en jeu un couplage fort entre les aspects compressibles et les transferts thermiques, en plus des phénomènes liés à la thermodynamique supercritique. D'un point de vue numérique, deux solveurs spécifiques ont été utilisés dans le cadre de cette thèse. Il s'agit, d'une part, du code CHOC-WAVES développé au CORIA pour la partie compressible et onde de choc et, d'autre part, le code PPMBFS développé à l'Université de Pennsylvanie (USA) pour les applications supercritiques et avec une thermodynamique variable. Sur le plan de la modélisation physique, l'approche LES a été utilisée, en appui des simulations DNS. Dans ce contexte, un modèle de sous-maille thermique, pour la prise en compte du Prandtl turbulent variable, a été intégré et validé. Les résultats obtenus, dans le cadre des LES et DNS d'un canal supersonique refroidi, ont permis de mieux analyser les corrélations aérothermiques ainsi que les structures cohérentes présentes au sein de cet écoulement. En particulier, il a été montré les limites de l'hypothèse de l'Analogie Forte de Reynolds (SRA) dans le cas d'écoulements fortement anisothermes, et le rôle joué par les structures tourbillonnaires dans l'accentuation des transferts pariétaux. La problématique des gaz réels a été ensuite examinée dans le cadre d'un canal industriel (en l'occurence EH3C). Cette étude a permis de mettre en évidence les difficultés (à la fois numérique et physique) liées à ce type d'écoulement. Les différentes investigations ont permis de fournir des informations utiles, notamment en ce qui concerne la phénoménologie des structures cohérentes et les différentes corrélations aérothermodynamiques.

Abstract

This research deals with the numerical simulation of compressible turbulent flows with heat transfers, applied to rocket engines. It relates more particularly the cooling of combustion chambers, in which a fluid flows in a supercritical state (high pressure and low temperature) inside millimeter channels. These problems involve complex physical phenomena and coupling between compressible aspects and heat transfer phenomena as well as supercritical thermodynamics. From a numerical point of view, two specific solvers have been used in the context of this thesis. The first code (CHOC-WAVES) has been developed in the CORIA lab for compressible flows and shock waves. The second one (PPMBFS) has been developed at the Pennsylvania University for applications with supercritical thermodynamics variables. In terms of physical modeling, the LES approach has been widely used in support of DNS. In this context, a thermal subgrid model using a variable turbulent Prandtl number, has been integrated and validated. A supersonic cooled channel has been simulated using both LES and DNS techniques and its results have been carefully analysed through the aerothermics correlations and coherent structures. In particular, it has been shown that the Strong Reynolds Analogy hypothesis (SRA), in the case of a strongly anisothermal flow is not valid anymore. The wall heat flux had an impact on the coherent structures. The issue of real gases was then examined through the industrial channel flow simulation (EH3C). This study has highlighted the difficulties (both numerical and physical) associated with this type of flow. The various investigations have provided useful information, especially regarding the phenomenology of coherent structures and various aerothermodynamics correlations.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes rapporteurs Bénédicte Cuénot et Françoise Bataille d'avoir analysé et jugé mon travail de thèse. Je suis aussi très reconnaissant envers les membres de mon jury, à savoir Marc Buffat, Julien Réveillon, Sandrine Palerm et Didier Saucereau pour l'examen minutieux de ces travaux.

Ces travaux de thèse se sont déroulés au sein du laboratoire UMR-CNRS-6614-CORIA. Je remercie Mourad Boukhalfa, directeur du laboratoire, ainsi que tous les personnels techniques et administratifs. Cette thèse a été financée par une bourse régionale de la région Haute-Normandie en partenariat avec la division moteursspatiaux de la SNECMA et le CNES.

Je remercie également Abdellah Hadjadj de m'avoir proposé ce sujet de thèse.

Naturellement, j'adresse de chaleureux remerciements à Guillaume Ribert pour m'avoir encadré pendant ces trois années de thèse. J'ai grâce à toi énormément appris. Merci pour ta gentillesse, ton soutien, ta disponibilité et tes questions avisées. Merci de m'avoir guidé vers le grade de docteur!

Je tiens également à remercier les doctorants et post-doctorants du laboratoire. C'est en grande partie grâce à eux que l'on doit l'ambiance agréable et détendue du laboratoire. Il m'est bien entendu impossible de tous les citer. Je citerai entre autres, Alexandre Naudin, Guido Lodato, Subramanian Vallinayagam Pillai, Guillaume Godel, Jean Phillipe Frenillot, Davy Ngomo Otogo, Cindy Merlin, Nicolas Enjalbert, Gautier Luret, Mechline Ayoub, Joseph Burguburu, Amélie Cabasse, Caroline Lecaplain, Elise Roulin, Marianne Sjöstrand, Chloé Caumont, Memdouh Belhi, Benoit Leveugle, Olivier Thomine, Guillaume Lodier, Matthias Malandain, François Pecquery, Catherine Gruselle. Je vous remercie pour toutes les pauses cafés et soirées permettant de décompresser et de maintenir une cohésion 'inter-générationelle'.

Un grand merci à Pascale Domingo, Ghislain Lartigue, Vincent Moureau et Luc Vervisch que j'ai eu le plaisir de côtoyer, et avec qui les échanges furent pour moi toujours très instructifs.

Enfin, je tiens à remercier ma famille, Nicolas et Emilie pour leur soutien dans les moments difficiles et m'avoir encouragé durant ces trois années.

Table des Matières

1 Introduction			7	
	1.1	Conte	xte industriel	7
	1.2	Conte	xte scientifique	10
	1.3	Plan o	le l'étude	21
2	Equ	ations	et Modèles	23
	2.1	Equat	ions de Navier-Stokes	23
	2.2	Thern	nodynamique supercritique	24
		2.2.1	Équation d'état de Soave Redlich Kwong	24
		2.2.2	Propriétés importantes des fluides en état supercritique	25
	2.3	Simula	ation Numérique Directe (DNS)	26
	2.4	Simula	ation aux Grandes Échelles (LES)	28
		2.4.1	Opérateur de filtrage	28
		2.4.2	Equations de Navier-Stokes filtrées	29
		2.4.3	Modèles de sous-mailles aérodynamiques	30
		2.4.4	Modèles de sous-mailles thermiques	33
3	Mé	thodes	numériques	35
	3.1	Code	CHOC-WAVES	35
		3.1.1	Discrétisation des termes convectifs : principe du schéma WENO	35
		3.1.2	Amélioration du schéma WENO5	39
		3.1.3	Discrétisation des termes diffusifs	42
		3.1.4	Discrétisation temporelle	44
		3.1.5	Validations 1D et 2D	45
	3.2	Code	PPMBFS	51
		3.2.1	Propriétés thermodynamiques	53
		3.2.2	Discrétisation temporelle et préconditionnement	55
		3.2.3	Discrétisation des termes convectifs	57
4	Car	nal sup	ersonique à parois isothermes	59
	4.1	Simula	ation Numérique Directe	59
		4.1.1	Paramètres principaux de la simulation	59
		4.1.2	Génération des conditions initiales	61
		4.1.3	Formulation du terme de forçage	62
		4.1.4	Domaine de calcul	64
		4.1.5	Ecoulement moyen et effets de compressibilité	66

		4.1.6	Analyse du champ instantané	71	
4.1.7 Frottement pariétal en fonction du nombre de Reynold			Frottement pariétal en fonction du nombre de Reynolds	74	
	4.2 Simulation aux Grandes Echelles			79	
		4.2.1	Mise en place des simulations	79	
		4.2.2	Comparaison des modèles de sous-maille	. 80	
	4.3	Conclu	usion	82	
5	Can	aux av	vec fluide supercritique	87	
6	6 Conclusions et perspectives 8			89	
	6.1	Conclu	usions	89	
	6.2	Perspe	ctives	91	
\mathbf{A}	A Méthode de Cardan pour la résolution des équations cubiques. 97			97	
в	3 Article AIAA Journal : Numerical Simulations of Shock Focusing			ıg	
	over Concave Surfaces 99				
С	C Méthode de Klein pour la génération de conditions initiales 109			109	
Bi	bliog	graphie		118	

Liste des symboles

Acronymes

CHOC-WAVES Compressible High-Order Code using Weno AdaptatiVE Stencils

- CPU Central Processing Unit
- DF4 Schéma aux Différences Finies d'ordre 4
- DLR Deutches zentrum für Luft und Raumfarht
- DNS Direct Numerical Simulation
- EAP Etage d'Accélérateur à Poudre
- EH3C Electricaly Heated Curved Cooling Channels
- GPU Graphic Processing Unit
- HARCC High Aspect Ratio Cooling Channels
- KH Kelvin Helmholtz
- LES Large Eddy Simulation
- MILES Monotically Integrated LES
- MPI Message Passing Interface
- PPMBFS Preconditionned Parallel Multi Bloc Flow Solver
- R&D Recherche & Développement
- RANS Reynolds-Averaged Navier-Stokes
- SRA Strong Reynolds Analogy
- SRK Soave Redlich Kwong
- TRR Transitionned Regular Reflection
- WENO5-SOL Weighted Essentially Non-Oscillatory d'ordre 5 avec les optimisations suivantes : disposition Symétrique des sub-stencils, les coefficients linéaires Optimisés et le Limiteur
- WENO5 Weighted Essentially Non-Oscillatory d'ordre 5
- WENO Weighted Essentially Non-Oscillatory

Exposants

 ϕ ' Fluctuations de la variable ϕ

- ϕ^+ Variable ϕ exprimée en unité proche paroi
- ϕ^0 Et at de référence de la variable ϕ

Lettres grecques

- α Fonction Alpha pour l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong
- δ_{ij} Symbole de Krönecker
- ϵ Dissipation (m⁻².s⁻³)
- η_k Echelle de Kolmogorov (m)
- γ Rapport des capacités calorifiques
- κ conductivité thermique (W.m⁻¹.s-1)
- Λ Echelle intégrale (m)
- λ_t Echelle de Taylor (m)
- μ Viscosité dynamique (kg.m⁻¹.s⁻¹)
- ω Facteur d'acentricité
- Φ Flux thermique (W.m⁻²)
- ρ Masse volumique (kg.m⁻³)
- σ_{ij} Tenseur des contraintes visqueuses (kg.m⁻¹.s⁻²)
- τ_{ij} Tenseur des contraintes de sous-maille
- $\vec{\omega}$ Vecteur de vorticité (s⁻¹)

Indices

- $_{\infty}$ Relatif à un état infini
- $_b$ Relatif à la valeur débitante
- *c* Relatif à la valeur critique de l'espèce considérée
- m Relatif à la valeur moyenne
- w Relatif à la valeur au mur
- $_{VD}$ Relatif à la variable ayant subie la transformation de van Driest

Notations

- *a* Coefficient pour la prise en compte des effets d'attraction entre les molécules dans l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong
- *b* Coefficient pour la prise en compte des effets de répulsion entre les molécules dans l'équation d'état de Soave-Redlich-Kwong
- c Vitesse du son (m.s⁻¹)
- C_I Coefficient du modèle de Yoshizawa
- C_p Capacité calorifique à pression constante (J.K⁻¹.kg⁻¹)
- C_s Coefficient du modèle de Smagorinsky
- C_v Capacité calorifique à volume constant (J.K⁻¹.kg⁻¹)

- E_i Energie interne spécifique (J.m³.kg⁻¹)
- E_t Energie totale spécifique (J.m³.kg⁻¹)
- h Enthalpie spécifique (J.m³.kg⁻¹)
- k Energie cinétique turbulent (m².s⁻²)

 k_{SGS} Nombre d'onde de coupure pour la résolution LES

- P Pression (Pa)
- Q Critère Q (s⁻²)
- q_i Flux de chaleur suivant la direction i (W.m⁻²)
- R_u Constante des gaz parfaits (J.K⁻¹.mol⁻¹)
- S_{ij} Partie symmétrique du tenseur de Reynolds (kg.m⁻¹.s⁻²)
- T Température (K)
- T_0 Température totale (K)
- U_{τ} Vitesse de frottement (m.s⁻¹)
- U_b Vitesse débitante (m.s⁻¹)
- W Masse molaire (kg.m⁻³.mol⁻¹)
- U_i Vitesse suivant la direction i (m.s⁻¹)

Opérateurs

- < > Opérateur de moyenne temporelle
- $\langle \rangle_z$ Opérateur de moyenne spatiale suivant la direction z
- $\overline{\phi}$ Opérateur de filtre (au sens de de Reynolds)
- $\partial/\partial t$ Opérateur dérivation partielle par rapport au temps
- $\partial/\partial x_i$ Opérateur dérivation partielle par rapport à la direction *i*
- $\tilde{\phi}$ Opérateur de filtre (au sens de Favre)

Nombres sans dimension

- CFL Nombre de Courant Friedlich Lax
- M Nombre de Mach
- Nu Nombre de Nusselt
- Pr Nombre de Prandtl
- Pr_t Nombre de Prandtl turbulent
- *Ra* Nombre de Rayleigh
- *Re* Nombre de Reynolds
- Re_{τ} Nombre de Reynolds basé sur la vitesse de frottement
- VNN Nombre de Fourier
- Z Facteur de compressibilité

Introduction

Sommaire

1.1	Contexte industriel	7
1.2	Contexte scientifique	10
1.3	Plan de l'étude	21

1.1 Contexte industriel

La propulsion d'Ariane 5 (Fig. 1.1) est assurée par deux moteurs à poudre EAP (Etage d'Accélérateur à Poudre) qui apportent la quasi-totalité de la poussée au décollage (90%). Les 10% de poussée restante sont assurés par le moteur cryotechnique Vulcain 2 (Fig. 1.2(a)) permettant la poursuite de l'extraction d'Ariane 5 du champ d'attraction gravitationnelle à très haute altitude et la satellisation.



Fig 1.1 – Décollage de la fusée Ariane 5 ECA le 19 avril 2008. Crédits CNES.

La dernière version de la fusée Ariane, dite ECA, se différencie du lanceur Ariane 5 classique par des modifications dans l'agencement intérieur afin d'améliorer la poussée et la capacité d'emport (jusqu'à 9,4 tonnes pour des satellites en orbite géostationnaire) et un étage supérieur cryotechnique qui remplace l'étage supérieur à propergol stockable d'ancienne conception. L'étage supérieur des EAP a aussi été modifié pour contenir 10% de propergol solide supplémentaire permettant d'augmenter la poussée de 50 tonnes pendant les 20 premières secondes du décollage. Au total, les deux EAP développent une poussée de 1300 tonnes au décollage, soit approximativement 10 fois la poussée du moteur cryotechnique Vulcain 2. Ce dernier reçoit aussi des améliorations pour augmenter de 20% sa poussée, la portant ainsi à 137 tonnes. Celles-ci sont obtenues, par exemple, par l'augmentation de la pression d'injection et un mélange plus riche d'environ 20% en oxygène liquide. D'autres modifications ont été apportées au moteur afin d'optimiser son fonctionnement dans les phases de vol en haute atmosphère et aux réservoirs dont la capacité a été augmentée pour alimenter le moteur pendant tout le temps d'utilisation (environ 540 secondes). Pour satisfaire ces nouvelles spécifications, la capacité des réservoirs a été portée à 150 tonnes d'oxygène liquide et à 25 tonnes d'hydrogène cryogénique.

Tous les éléments constitutifs du moteur sont soumis à de très fortes contraintes thermiques. Plus particulièrement, les canaux de refroidissement sont en charge du maintien en dessous d'une température admissible les parois de la chambre de combustion. Des canaux mal adaptés peuvent être une cause de dysfonctionnement du moteur.



Fig 1.2 – Moteur cryotechnique Vulcain 2 (a) et un schéma de son principe de fonctionnement (b).

Pour mieux saisir les tenants et aboutissants de la difficulté que représente la conception du système de refroidissement, il est nécessaire de s'attarder sur le mode de fonctionnement du moteur qui a été conçu autour du cycle schématisé sur la Fig. 1.2(b). Pour des raisons pratiques, l'hydrogène et l'oxygène cryogéniques sont stockés dans les réservoirs à des pressions de quelques bars (3,5 bar pour l'oxygène et 2,15 bar pour l'hydrogène) mais à très faibles températures. Afin d'améliorer l'efficacité de la propulsion, les deux fluides sont pressurisés après leur passage dans des turbopompes à des pressions avoisinant les 100 bar. La combustion du mélange O_2/H_2 conduit à une température à l'intérieur de la chambre autour de 3500 K bien loin de la température admissible par le NARLoy-Z, alliage de cuivre à forte conductivité thermique ($\kappa \approx 350 \text{ W/m/K}$) qui ne peut supporter que des températures limites de l'ordre de 800 K avant détérioration. Les flux thermiques résultants sont donc très intenses et ceux-ci peuvent atteindre 80 MW/m², voire plus au col de la tuyère.

L'alimentation de la chambre de combustion en réactif est assurée par deux tur-

bopompes entrainées par des gaz produits par la combustion d'une faible partie des réactifs (environ 3%) dans une chambre annexe. Le circuit d'hydrogène se dirige vers un circuit de refroidissement intégré aux parois de la chambre de combustion. L'hydrogène sous haute pression et basse température se réchauffe alors en remontant vers la chambre de combustion. L'objectif est double : le premier est de récupérer une partie de l'énergie de la combustion perdue par transfert thermique à la paroi et de la réinjecter dans la chambre de combustion améliorant ainsi le rendement de la combustion; le second est d'assurer l'intégrité mécanique des parois de la chambre et d'une partie du divergent en le refroidissant. La mauvaise évaluation des transferts thermiques dans ces canaux de refroidissement impacte donc au niveau de la propulsion, mais surtout, peut aussi conduire à la perte du lanceur. En cas d'échange thermique trop important, les canaux se déforment en 'une niche de chien' (Fig. 1.3) appelé 'Dog House effect' en anglais. La déformation des canaux de refroi-



Fig 1.3 – Phénomène de 'Dog House' d'un canal déformé à cause d'un sous-dimensionnement du flux thermique.

dissement se traduit par des fissurations de la paroi de la chambre de combustion où de l'hydrogène est réinjecté. Cette alimentation secondaire a lieu après la zone de combustion principale et ainsi modifie la répartition thermique sur le divergent. La structure mécanique du divergent ne pourrait pas endurer ce traitement et commencerait à se déformer, désaxant ainsi la poussée du moteur et rendant impossible le contrôle du lanceur.

Le refroidissement des parois de la chambre de combustion est un point critique du moteur. La connaissance fine et la prédiction des flux thermiques représentent des enjeux industriels importants. Ces travaux s'inscrivent dans cette optique et sont financés par le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) et par SNECMA (groupe SAFRAN) qui est le maitre d'œuvre des systèmes de propulsion cryotechnique du lanceur européen ARIANE 5. Ce constat est d'autant plus présent que la prochaine génération de moteur utilisera des cycles où ces transferts thermiques joueront un rôle encore plus prépondérant.

La problématique des canaux de refroidissement peut aussi s'appliquer au moteur Vinci (voir Fig. 1.4(a)), successeur du moteur HM-7B qui assure la propulsion du troisième étage de la fusée. Etant de technologie assez ancienne (utilisé pour la première fois sur Ariane 1 en 1979), il ne peut être rallumé en vol, ce qui est un désavantage certain pour placer des satellites sur des orbites différentes. Pour résoudre cet inconvénient, les études de son remplaçant, le Vinci, ont commencé en 1998 et ont utilisé tout le savoir-faire acquis lors de la conception et l'exploitation de Vulcain 2. Le moteur Vinci utilise un nouveau principe de fonctionnement : le cycle 'expander' (Fig. 1.4(b)). Ce principe est basé sur l'utilisation d'une partie de l'énergie récupérée par transfert thermique dans la chambre de combustion pour faire tourner les turbopompes rendant l'alimentation totalement autonome. Cette énergie est récupérée par l'hydrogène circulant dans les canaux de refroidissement. Elle est transférée aux turbopompes via sa détente au travers des aubes des turbines. Dans le cas du cycle 'expander', la connaissance de l'énergie transférée au fluide dans les canaux devient ainsi d'autant plus critique qu'elle conditionne le fonctionnement des turbopompes ainsi que tous les organes d'alimentation. Comme pour le moteur



Fig 1.4 – Moteur cryotechnique Vinci (a) et un schéma de son principe de fonctionnement : cycle 'expander'(b).

Vulcain 2, une connaissance fine de l'écoulement dans ces canaux de refroidissement devient primordiale. Le fluide qui s'écoule est de l'hydrogène à une pression d'environ 200 bar et à une température variant entre 40K et 80K. Dans ces conditions, l'hydrogène est dans un état thermodynamique dit supercritique (Fig. 1.5). Le tableau 1.1 donne les pressions et températures critiques de quelques espèces connues et utilisées pour la propulsion aérospatiale.

1.2 Contexte scientifique

La problématique supercritique complexifie la compréhension des transferts thermiques dans ces canaux de refroidissement de part le caractère fortement non-linéaire des équations d'état et de la thermodynamique associée. Dans ce travail, les approches numériques résolvant tout ou partie de la turbulence sont retenues. Ces outils permettent d'accéder à une grande variété de variables nécessaires à la mise

Espèces	P_c (bar)	T_c (K)
O_2	$45,\!43$	$159,\!55$
H_2	12,98	$33,\!15$
CH_4	$45,\!96$	$190,\!45$

Tableau 1.1 – Pressions et températures critiques de quelques espèces classiquement utilisées dans les moteurs-fusées.



Fig 1.5 – Diagramme pression-température avec son point critique (C) et sa zone supercritique.

au point de modèles physiques utilisés dans les méthodes industrielles de conception.

Ces systèmes de refroidissement ont été étudiés avec des installations expérimentales pour caractériser l'influence des propriétés géométriques (allongement et courbure) sur l'écoulement et le transfert thermique. Le DLR (Deutches Zentrum für Lutf und Raumfahrt) dispose de deux d'entre elles : le banc P8 HARCC [101] (High Aspect Ratio Cooling Channels) et le banc EH3C [107, 80, 106] (Electrically Heated Curved Cooling Channels).

Sur le banc HARCC, différents facteurs de forme (rapport hauteur/largeur, H/L) disposés dans des secteurs de chambre différents (Fig. 1.6) sont testés dans des mêmes conditions opératoires. Le banc EH3C (Fig. 1.7) est, quant à lui, dédié l'étude de la répartition des flux thermiques dans un canal courbe. Ces deux installations expérimentales utilisent également des méthodologies différentes pour générer la charge thermique. Alors que les canaux du banc P8 sont placés autour d'une véritable chambre de combustion, le flux thermique sur le banc EH3C est produit électriquement et est concentré sur une des parois du canal. De ces deux méthodes résulte une différence fondamentale dans l'imposition de la contrainte thermique. Un flux thermique est imposé (mais pas connu exactement) sur le banc EH3C. Les mesures sur ces installations sont essentiellement des mesures de température dans les parois du canal. En effet, les mesures optiques par laser présentent des difficultés relativement importantes à cause de la forte variation de l'indice optique et l'accès optique très difficile de part les tailles réduites des canaux étudiés (4,6 mm de hauteur et

0,5 mm de largeur).



Fig 1.6 – Schéma de l'installation expérimentale HARCC.



Fig 1.7 – Schéma de l'installation expérimentale EH3C. (extrait de Quering *et al.* [80])

Dans ce cas, l'approche numérique devient un outil utile car elle permet d'avoir accès à un grand nombre d'informations, telles que les données thermiques ou aérodynamiques. Parmi l'éventail des méthodes de résolution existantes, trois grandes familles émergent. Elles se différencient par leurs approches de la résolution de la turbulence qui va de la résolution complète de la Simulation Numérique Directe (SND ou DNS en anglais pour Direct Numerical Simulation) à la modélisation complète de la méthode RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), en passant par la modélisation des plus petites échelles pour les Simulations aux Grandes Echelles (SGE ou LES en anglais pour Large Eddy Simulation) (Fig. 1.8).

Le niveau de résolution de la turbulence est aussi relié à la finesse de la grille de calcul. Le maillage doit être calibré pour pouvoir résoudre directement l'échelle la plus petite imposée par la méthode de résolution employée. Par exemple, pour la méthode RANS, la turbulence étant entièrement modélisée, le maillage n'a pas



Fig 1.8 – Schéma montrant l'effet des trois niveaux de description sur un signal de vitesse. (Figure tirée de Roux, 2007 [86])

besoin d'être très fin à l'exception des couches limites. En revanche, pour la méthode DNS, la finesse du maillage revêt une importance cruciale pour la précision des résultats, car toutes les échelles de la turbulence doivent résolues. Entre les deux se situe la méthode LES qui va alors nécessiter une grille intermédiaire dont le niveau de raffinement est à déterminer suivant la précision souhaitée.

Il est alors important de définir un critère qui permettra de pouvoir différencier l'utilisation des trois méthodes présentées ci-dessus. Celui-ci est le nombre de Reynolds¹ de l'écoulement considéré et il est défini comme :

$$Re = \frac{\text{efforts convectifs}}{\text{efforts visqueux}} = \frac{\rho UL}{\mu} . \tag{1.1}$$

L est une longueur caractéristique de l'écoulement (par exemple le diamètre d'un cylindre, la longueur d'une tuyère ou H la demi hauteur d'un canal) et U est une vitesse de référence (généralement la vitesse loin de l'objet ou une vitesse débitante), ρ et μ sont respectivement la masse volumique et la viscosité dynamique dans un état de référence (loin de l'objet ou à l'injection). En deçà d'une valeur critique Re_c , l'écoulement est dit laminaire. Au delà, il devient turbulent.

Dans le cas d'un écoulement au-dessus d'une plaque plane, le nombre de Reynolds est ici fonction de la position x (Eq. (1.2)) : celui-ci est laminaire au début de la plaque puis turbulent ensuite (Fig. 1.9)² :

$$Re_x = \frac{\rho_\infty U_\infty x}{\mu_\infty} \tag{1.2}$$

Lors de la transition du régime laminaire au régime turbulent, l'agitation des tourbillons présents dans l'écoulement est bien plus forte et devient quasi-aléatoire.

La turbulence met donc en jeu différentes tailles d'échelles de tourbillons : de très grands tourbillons responsables du mouvement global de l'écoulement et de très petits tourbillons responsables de la dissipation de l'énergie. La gamme d'échelles balayée s'étend ainsi de l'échelle intégrale à l'échelle de Kolmogorov. L'échelle intégrale

^{1.} Osborne Reynolds en 1883.

^{2.} $Re_c \approx 2000$ pour une plaque plane.



Fig 1.9 – Illustration de la transition du régime laminaire au régime turbulent d'un écoulement au dessus d'une plaque plane. Extrait de [110].

représente la longueur à laquelle les corrélations des fluctuations de vitesse sont presque nulles. Elle est donc liée aux plus grandes structures de l'écoulement productrice de l'énergie de la turbulence et a un temps caractéristique assez long (de l'ordre de la microseconde). L'échelle de Kolmogorov est la taille des plus petits tourbillons, lieux où la dissipation visqueuse devient très importante, et où l'énergie de la turbulence est dépensée. Son temps caractéristique est bien plus faible (de l'ordre du millième de microseconde). Entre ces deux longueurs, il existe l'échelle de Taylor qui correspond à l'équilibre entre la production et la dissipation.

Pour décrire numériquement toute la turbulence, il faut pouvoir capter ces échelles de petite taille aussi bien que celles de grande taille. Une estimation du nombre de points nécessaires pour étudier la turbulence dans son intégralité est donnée par le nombre de Reynolds à la puissance 9/4. De plus, des contraintes de stabilité numériques imposent que les incréments temporels soient en accord avec les plus petites échelles résolues. Plus celles-ci sont petites, plus le pas de temps nécessaire est court. Cependant, les grandes échelles doivent être résolues sur plusieurs longs temps caractéristiques. Tout ceci amène à des temps de calcul très élevés (avec les capacités informatiques actuelles) dès que le nombre de Reynolds devient trop élevé.

Ainsi, pour les grands nombres de Reynolds, la turbulence doit être complètement modélisée ce qui est le principe des méthodes statistiques telles que le RANS. Dans les équations de Navier-Stokes, le signal instantané, f, est décomposé en deux : sa moyenne $\langle f \rangle$ et sa fluctuation $f' = f - \langle f \rangle$. Après l'application de l'opération de moyenne sur les équations du mouvement d'un fluide, nous obtenons les équations RANS qui décrivent l'évolution des grandeurs moyennes. Cependant, des termes provenant des fluctuations restent dans les équations. Afin de fermer le système (*i.e.* avoir autant d'inconnues que d'équations à résoudre), il convient d'adopter des modèles de fermeture de la turbulence. Ceux-ci peuvent présenter différents niveaux de complexité. Le plus connu et plus couramment utilisé est le modèle à deux équations de transports basés sur la dissipation, ϵ , et la production de l'énergie cinétique, k [47, 54]. Ce modèle à deux équations a connu différentes variantes jouant sur des changements de variables (modèle k- ω et ses variantes [118, 119, 67, 68]), ou des réécritures des équations pour tenir compte de différentes échelles caractéristiques (modèle k- ϵ Re-Normalisation Group - RNG [120]). Des modèles plus complexes existent tels que les modèles algébriques (Algebraic Stress Model - ASM) [84, 31] ou des modèles résolvant les équations des contraintes turbulentes (Reynolds Stress Model - RSM) [53, 78]. Historiquement, les modèles de type RSM sont apparus en premier, ils résolvent une équation pour chaque composante du tenseur de Reynolds (six au total de part la symétrie du tenseur) au lieu de ne considérer que la trace dans le modèle k- ϵ classique. L'effort de calcul étant conséquent, des approches simplificatrices ont été abordées amenant aux modèles de type algébriques. Le principal défaut de l'approche statistique (RANS) est le fait que le modèle ait à représenter une très large gamme d'échelles. Les grandes échelles sont très sensibles à la géométrie et aux conditions aux limites, tandis que les petites échelles ne dépendent presque que la viscosité et très peu de l'espace. Ainsi, les coefficients du modèle utilisé ont besoin d'être ajustés en fonction des écoulements considérés. Cette méthode permet de simuler des installations industrielles avec des nombres de Reynolds élevés ($Re \geq 10^6$) pour un temps de calcul raisonnable.

Pour la méthode LES, seules les petites structures considérées isotropes sont modélisées, tandis que les grandes échelles devront être résolues (voir Fig. 1.10). Le nombre d'onde de coupure $k_{SGS} = \pi/\Delta$ (avec Δ la taille de maille) représente la taille minimale des échelles résolues et est défini par la taille des mailles utilisées. La LES fournit une solution instationnaire et tridimensionnelle des équations de Navier-Stokes. Les équations et certains modèles de sous-mailles seront développés dans le chapitre 2. Avec les capacités informatiques actuelles, la gamme de nombre de Reynolds pour une étude LES varie entre 10^4 à 10^6 pour un temps de calcul raisonnable. A noter qu'avec les évolutions futures des capacités informatiques, la taille des installations pouvant être simulées pourra augmenter et ainsi atteindre les tailles auparavant accessibles uniquement par la méthode RANS [79].



Fig 1.10 – Schéma de principe de la LES. (Figure tirée de Pope, 2000 [79])

La DNS résout directement les équations de Navier-Stokes sans aucun modèle.

Elle requiert un maillage suffisamment fin pour capturer les plus petites échelles de la turbulence (de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov) et un schéma numérique suffisamment précis. La solution obtenue est l'écoulement tridimensionnel où les seules erreurs sont les erreurs numériques. Cependant, le maillage très fin induit un coût de calcul très élevé. C'est pour cela que ce type de description est utilisé uniquement pour simuler des expériences de faibles dimensions et/ou à faible nombre de Reynolds ($Re < 10^4$). Cependant, la DNS s'avère être un outil très puissant pour une étude approfondie du comportement car il permet d'accéder à l'ensemble des valeurs sans passer par le filtre qu'est un modèle. De la même manière, l'évolution des capacités informatiques va étendre les possibilités de la simulation DNS vers la partie basse de l'ancien champ d'utilisation des LES.

Les trois méthodes présentées ne constituent pas l'ensemble du panel des méthodes disponibles. D'autres méthodes intermédiaires existent telle que la DES (Detached Eddy Simulation) [98, 100] qui combine les approches RANS et LES. Il est à noter que la précision de ces méthodes est aussi directement liée à la précision de la grille de calcul. Par exemple, une LES sous-résolue se rapproche d'un calcul RANS, et une DNS sous-résolue se rapprochera de l'approche LES sans modèle, *i.e.* MILES (Monotically Integrated LES [8]).

Dans le cadre de cette étude, les deux approches, DNS et LES, seront employées sur des cas-tests académiques pour pouvoir fournir une base de données utiles au calibrage des modèles utilisés lors des phases de conception. Au cours de ce travail, l'aspect thermique sera d'abord abordé séparément pour pouvoir analyser finement la turbulence qui joue un rôle important dans l'échange thermique entre la paroi et le fluide. Cette étude sera réalisée dans un cas supersonique afin de s'affranchir des conditions aux limites subsoniques. Les aspects supercritiques seront ensuite traités sur des configurations expérimentales (EH3C) afin de quantifier leurs impacts sur les conclusions de la première partie.

La structure de la turbulence dans les canaux joue un rôle prédominant dans l'échange thermique entre la paroi et le fluide. Les premiers pas dans la compréhension des écoulements confinés ont été réalisés à la fin des années 70 au travers de nombreuses expériences qui ont permis d'acquérir les premières informations sur les profils moyens de vitesse ou du coefficient de frottement, par exemple [10, 27, 28, 95, 99]. Un lien fort entre les effets de compressibilité et le transfert thermique a alors été mis en évidence.

Ces aspects peuvent être étudiés sous deux angles : le premier grâce aux valeurs moyennes de variables thermodynamiques, telles que la densité ou la viscosité, et le second grâce à leurs fluctuations et leurs corrélations. Ce premier point est très souvent abordé via la transformation de van Driest [109] qui permet de prendre en compte les effets de densité dans le profil moyen de vitesse. C'est d'ailleurs une des briques fondamentales du travail de Morkovin qui lui permettra de définir une relation entre les diverses fluctuations aérothermodynamiques et d'être le précurseur de la seconde voie de l'analyse des effets de compressibilité. Un peu plus tard, Fernholz & Finley [28] ont observé dans une couche limite compressible sans gradient de pression et avec des parois adiabatiques ou isothermes que les profils de vitesse ayant subi la transformation de van Driest s'accordent avec les profils du même écoulement dans le cas incompressible. Cependant, Zhang *et al.* [124] rapportent qu'à proximité d'une paroi adiabatique les profils non-transformés de vitesse sont proches de leurs homologues incompressibles. Une autre étude, proposée par Huang & Coleman [41], a permis de conclure que la transformation de van Driest n'était pas adaptée aux écoulements à faible nombre de Reynolds, alors qu'elle obtient de très bons résultats pour des écoulements à plus fort nombre de Reynolds [28, 99]. Malgré tous ces efforts, la connaissance exacte des profils moyens de vitesses et de fluctuations dans des écoulements confinés, surtout en présence de forts gradients thermiques, n'est pas encore totalement élucidée à cause de la difficulté de mesure de variables thermodynamiques dans des écoulements à haute vitesse [95, 99].

Morkovin [73] a émis l'hypothèse que dans les couches limites les effets de compressibilité sont dus aux fluctuations de vitesse. Il en déduit que la structure de la turbulence, dans les couches limites compressibles, est la même que celle de son homologue incompressible une fois les effets de compressibilité pris en compte [10, 73, 95]. Un développement similaire a été aussi réalisé par White [117] qui a proposé une analogie de Reynolds pour les couches de mélange incompressibles. Morkovin a aussi affirmé que son travail peut aussi être applicable aux écoulements confinés et l'a appelée la 'Strong Reynolds Analogy' (SRA). Cependant, l'hypothèse d'adiabaticité des parois a été posée pour obtenir ces relations. Afin de lever cette restriction, de récentes études ont permis d'obtenir des relations pour des parois isothermes [32, 42, 87]. Ainsi, des études plus poussées sur la structure de la turbulence, dans ces écoulements des canaux, permettent de mieux relier les fluctuations aérothermodynamiques entre elles.

Coleman et al. [21] ont réalisé une DNS, qui encore aujourd'hui, reste le cas-test de référence d'un canal isotherme. Ils ont pu prouver que les profils de vitesse incompressibles et compressibles deviennent équivalents dès qu'on leur applique la transformée de van Driest. Les données obtenues lors de cette étude ont été profondément analysées par Huang et al. [42]. Ils ont pu démontrer que les termes de compressibilité les plus évidents tels que la corrélation pression-dilatation et le taux de dissipation compressible qui apparaissent dans le bilan de l'énergie cinétique turbulente sont négligeables dans un canal supersonique isotherme. De la même manière, la SRA proposée par Morkovin ou même son extension proposée par Cibeci et Smith [16] ne sont plus applicables dans de tels canaux isothermes. Rubesin et al. [87] et Gaviglio et al. [32] ont proposé une nouvelle formulation de la SRA qui s'accorde mieux avec les résultats de la simulation de Coleman. Dans les travaux de Huang et al. [42], elles furent testées dans le cadre du canal isotherme de Coleman. Elles se sont révélées plus précises mais laissent encore place à de meilleures corrélations. Huang et al. proposèrent ainsi une autre formulation qui améliora la prédiction de la corrélation entre les fluctuations de vitesses et de température. Les différentes expressions sont toutes retranscrites ci-dessous dans l'ordre chronologique.

 $1962 : \text{formulation de Morkovin } [73] : \frac{T'/\langle T \rangle}{u'/\langle u \rangle (\gamma - 1) \langle M \rangle^2} \approx 1$ $1987 : \text{formulation de Gaviglio et al. } [32] : \frac{T'/\langle T \rangle}{u'/\langle u \rangle (\gamma - 1) \langle M \rangle^2} \approx \frac{1}{\langle \partial \langle T_0 \rangle / \partial \langle T \rangle - 1\rangle}$ $1990 : \text{formulation de Rubesin et al. } [87] : \frac{T'/\langle T \rangle}{u'/\langle u \rangle (\gamma - 1) \langle M \rangle^2} \approx \frac{1}{1,34 \langle \partial \langle T_0 \rangle / \partial \langle T \rangle - 1\rangle}$ $1995 : \text{formulation de Huang et al. } [42] : \frac{T'/\langle T \rangle}{u'/\langle u \rangle (\gamma - 1) \langle M \rangle^2} \approx \frac{1}{Pr_t(\partial \langle T_0 \rangle / \partial \langle T \rangle - 1)}$

L'influence des conditions aux limites à la paroi (adiabatiques ou isothermes) a été étudiée par Brun *et al.* [11]. Celui-ci a proposé une modification supplémentaire,

permettant la prise en compte du flux thermique dans le cas d'une paroi isotherme.

La compréhension précise des transferts pariétaux requiert des informations fiables sur les mécanismes de production et dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Guarini *et al.* [38] ont étudié ces transferts énergétiques à proximité d'une paroi adiabatique dans une couche limite compressible. Ils ont conclu que ces transferts étaient presque les mêmes que ceux dans un écoulement équivalent incompressible. Cependant, la méconnaissance des différences et similarités entre les écoulements compressibles ou incompressibles ne permet de conclure de manière générale à un comportement simple. De plus, les transferts thermiques, utilisés dans les études avec des parois isothermes, ne sont pas très élevés, au mieux quelques dizaines de kW.m⁻².

Dans le cas des canaux de refroidissement des moteurs-fusées, des fluides à très faibles températures et sous haute pression sont utilisés afin de pouvoir évacuer un important flux thermique de l'ordre de la dizaine de MW.m⁻². Ils se trouvent alors dans un état dit supercritique. Une telle situation influe grandement sur la dynamique des écoulements confinés. En effet, la loi d'état, qui relie la pression, la masse volumique et la température, présente un caractère fortement non linéaire. Différentes formulations peuvent être considérées pour prendre en compte ces effets de gaz réels. Certaines telles que les équations de Van der Waals (VdW [108]), de Redlich-Kwong (RK [82]) puis modifiée par Soave (SRK [96]), Peng-Robinson (PR [75]), Elliot-Suresh-Donohue (ESD [48]) présentent un caractère cubique pour la masse volumique et nécessitent donc une résolution spécifique comme celle proposée par Cardan [14] (voir Annexe A).

Ce comportement particulier des équations d'état conduit à la présence d'effets thermo-acoustiques importants et également à de très fortes variations de masse volumique pour de très faibles variations de température. Par exemple, l'effet piston, prédit théoriquement par Boukari *et al.* [9] et Zappoli *et al.* [123], et observé expérimentalement par Garrabos [30], est un phénomène caractéristique du caractère hautement non-linéaire de l'équation d'état. Lors d'un changement de température à une condition limite, une onde de pression est produite et chauffe uniformément le fluide : c'est l'effet piston. La forte non-linéarité de l'équation d'état à proximité du point critique permet de la déclencher pour une faible variation de température de l'ordre de quelques mK.

Ce phénomène peut être l'élément perturbateur permettant de créer des cellules de Rayleigh-Bénard (RB) qui s'apparentent à des cellules convectives favorisant l'échange thermique (voir exemple présenté sur Fig. 1.11). Le mode de formation de ce type d'instabilité peut être réalisé en disposant un fluide au repos soumis à un champ de gravité confiné entre des parois horizontales initialement à la température du fluide. En réchauffant légèrement la paroi inférieure du dispositif, un transfert thermique s'établit, le fluide chaud étant entraîné vers le haut par effet de gravité. Au delà d'une température limite, le fluide se déstabilise et fait apparaitre des structures cohérentes en forme de cellules de RB. Celles-ci existent aussi bien à de très faibles tailles comme dans une boite de Petri, qu'à de très grandes échelles, comme par exemple dans l'atmosphère de la Terre ou son manteau. Ces instabilités peuvent être étudiées analytiquement à partir du nombre sans dimension de Rayleigh, noté Ra. En deçà d'une valeur critique de 2000, l'échange thermique se fera principalement par conduction tandis qu'au delà le transfert énergétique conducto-convectif se mettra en place assurant un échange thermique plus efficace.



Fig 1.11 – Exemples de cellules convectives de Rayleigh-Bénard.

Pour un fluide proche de son état supercritique, les premières cellules de RB furent étudiées numériquement pour le cas du CO_2 dans une configuration bidimensionnelles par Amiroudine *et al.* [3]. Deux étapes de déstabilisation ont été identifiées. La première dominée par l'effet piston transfert l'énergie uniformément ; la stabilité du fluide est conservée. A partir d'un certain stade, le nombre de Rayleigh excède la valeur critique de 2000 et le fluide se déstabilise pour assurer le transfert thermique par convection naturelle. Des études tri-dimensionnelles comme celle d'Accary *et al.* [1] (Fig. 1.12) ont permis de mieux cerner le développement de ces cellules dans le cas d'un fluide dans un état thermodynamique très proche de son point critique.

L'utilisation de fluide cryogénique supercritique pour le refroidissement des moteurs-fusées permet de maximiser l'écart de température entre le fluide et la paroi. Dans le cas du cycle expander, l'énergie récupérée par le fluide est utilisée pour faire tourner les turbopompes qui alimentent la chambre de combustion. Une étude d'un écoulement en canal avec un fluide supercritique a été réalisée par Li et al. [60] visant principalement à étudier les mécanismes de transferts thermiques. Pour cela, le canal est parcouru par du dioxyde de carbone à une pression de 80 bar et une température proche de 315 K (pour mémoire $P_c(CO_2) = 73$ bar et $T_c(CO_2) = 306$ K). Des conditions périodiques sont imposées dans les sens longitudinal et transverse à l'écoulement principal. Les deux parois sont successivement plus chaudes puis plus froides le long du canal (± 5 K). Il est ainsi possible d'étudier les deux parties de l'écoulement simultanément. Dans cette étude, le nombre de Nusselt est utilisé pour comparer l'efficacité réfrigérante des deux parties du canal. En effet, ce nombre sans dimension est construit pour comparer les échanges thermiques effectués par conduction et par convection. Lorsque la convection est prédominante, il tend vers l'infini, tandis qu'il sera nul pour une forte conduction. L'échange thermique étant plus efficace par convection, une valeur élevée traduira un meilleur rendement énergétique du système de refroidissement. Dans le cas du canal supercritique de Li et al., il s'avère que la région où la température du fluide est inférieure à celle de la paroi présente le nombre de Nusselt plus élevé. Cette conclusion est due à une forte augmentation du nombre de Prandtl (car le fluide se rapproche du point critique), ce qui accroit les flux thermiques turbulents d'environ 30 %. Il faut également noter que le pic est plus éloigné de la paroi.

Une des propriétés particulières des canaux des moteurs-fusées est leur très fort facteur de forme, environ $H/L \approx 9$. Il est utilisé pour optimiser le transfert thermique



Fig 1.12 – Evolution temporelle d'un écoulement de CO₂ supercritique par effet de chauffage pariétal de 1 mK avec quelques isosurfaces de température. (Extrait de Accary *et al.* [1])

pour une perte de charge donnée le long du canal [15]. Knab *et al.* [51] ont comparé le modèle de Nusselt monodimensionnel utilisé pour le dimensionnement avec des calculs 3D RANS de canaux de refroidissement aussi bien droits que courbés. Ils ont montré que les simulations étaient alors incapables de retranscrire un phénomène de confinement, tels que les écoulements secondaires aux coins des parois du canal. Par la suite, des modèles ont été développés pour retrouver ces écoulements secondaires avec des simulations RANS. Ainsi, Jung *et al.* [49] proposent une comparaison expérience/calcul de canaux de refroidissement. Un point intéressant de cette étude est l'utilisation de la tabulation de la thermodynamique. En effet au lieu de résoudre l'équation cubique et calculer les différentes propriétés thermodynamiques directement au cours du calcul, ils sont calculés préalablement et rangés dans un tableau à deux entrées, pression et température. Cette technique est relativement limitée du fait que la table doit couvrir toute l'étendue des variables d'entrée avec suffisamment de précision. Les mesures expérimentales choisies sont des mesures de température dans la paroi du canal. Pour cela, le champ de température est également résolu dans le solide grâce à une équation de chaleur. La résolution de l'écoulement par la méthode RANS présente de grandes difficultés à prédire correctement le flux de chaleur pariétal. Il en découle que le champ de température simulée dans le solide est assez différent de celui observé dans l'expérience.

Toutes les études expérimentales de canaux de refroidissement avec un fluide supercritique, même les plus récentes, présentent des mesures de température dans les parois du spécimen. Il n'existe pas de mesures directes dans le fluide. Les dimensions millimétriques de ce type de canal ainsi que la problématique de la haute pression régnant à l'intérieur de celui-ci rendent difficiles les accès optiques. De plus, les mesures avec des lasers sont également affectées par les phénomènes haute pression. En effet, la forte variation d'indice optique est une propriété des gaz supercritiques et rend donc très difficile l'interprétation des données recueillies. Ce phénomène a été observé par Cessou et al. [17] dans le cas d'une imagerie Raman. Sur la Fig. 1.13(a), la fenêtre d'observation est identique avec la taille de la nappe laser, tandis que sur la Fig. 1.13(b) la fenêtre d'observation est plus large que la nappe laser. Toutes choses étant égales par ailleurs, une petite poche de fluide détachée du jet, prouve qu'une partie de l'énergie du laser a été déviée par la forte variation optique. L'utilisation de ce type de mesures est donc critiquable, voire inutilisable. L'éventail des mesures disponibles pour obtenir des informations qualitatives sur la dynamique de ce genre écoulement devient alors relativement restreint.



Fig 1.13 – (a) : Imagerie instantanée Raman d'un jet d'oxygène liquide (point C60 du banc MASCOTTE); (b) Exemple d'une imagerie instantanée Raman d'un jet d'oxygène liquide et le profil de l'impulsion laser correspondante. (tirées de Cessou *et al.* [17])

1.3 Plan de l'étude

Ce premier chapitre d'introduction a permis de poser les différentes problématiques afférentes aux canaux de refroidissement des moteurs-fusées. Le deuxième chapitre sera consacré à la présentation des équations de Navier-Stokes et de leurs méthodes de résolution. Les différents modèles nécessaires à leurs fermetures sont aussi présentés. Ensuite, le chapitre 3 abordera les méthodes numériques utilisées dans le cadre de cette thèse. Enfin, une étude d'un canal supersonique aussi bien en DNS qu'en LES sera présentée dans le quatrième chapitre. A cette occasion, les effets de compressibilité, les structures tourbillonnaires, une analyse de dimensionnement *a priori* d'un maillage DNS ou LES, et la comparaison de modèles de sous-mailles seront exposés. Dans le chapitre 5, la problématique des effets de gaz réels sera abordée. De par les différentes méthodes de résolution, une première vérification basée sur le canal supersonique précédemment présenté sera menée. Dans la suite de ce chapitre, des canaux de refroidissement à fort facteur de forme seront simulés et analysés. Et enfin, le dernier chapitre sera consacré aux conclusions générales et aux perspectives de ce travail de thèse.

Ces travaux ont été financées par le Centre National d'Etudes Spatiales (CNES) et par SNECMA (groupe SAFRAN) qui est le maitre d'œuvre des systèmes de propulsion cryotechnique du lanceur européen ARIANE 5.

Equations et Modèles

Sommaire

2.1	2.1 Equations de Navier-Stokes		
2.2 Thermodynamique supercritique			24
	2.2.1	Équation d'état de Soave Redlich Kwong $\ldots \ldots \ldots$	24
	2.2.2	Propriétés importantes des fluides en état supercritique $\ . \ .$	25
2.3 Simulation Numérique Directe (DNS)			26
2.4	Sim	ulation aux Grandes Échelles (LES)	28
	2.4.1	Opérateur de filtrage	28
	2.4.2	Equations de Navier-Stokes filtrées	29
	2.4.3	Modèles de sous-mailles aérodynamiques	30
	2.4.4	Modèles de sous-mailles thermiques	33

2.1 Equations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes régissent le comportement de fluides vérifiant l'hypothèse du milieu continu. Ces équations sont basées sur la conservation de trois grandeurs principales : la masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale. Il en découle une équation différentielle pour chacune de ces grandeurs :

– Conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad ; \tag{2.1}$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.2)$$

- Conservation de l'énergie totale

$$\frac{\partial \rho E_t}{\partial t} + \frac{\partial (\rho E_t + P)u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad ; \tag{2.3}$$

où ρ est la masse volumique, P la pression statique, u_i la composante du vecteur vitesse selon la direction i, σ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, E_t l'énergie totale spécifique, et q_j le flux de chaleur. L'énergie totale s'exprime ainsi :

$$\rho E_t = \rho E_i + \frac{\rho}{2} u_i u_i \quad \text{avec } E_i \text{, l'énergie interne spécifique,}$$
(2.4)

Le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit :

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} , \qquad (2.5)$$

où la viscosité dynamique, μ , est calculée à l'aide la loi de Sutherland (Eq. (2.6)). Elle reste valide dans la gamme de température qui sera rencontrée dans les études avec l'hypothèse de gaz parfait.

$$\mu = \mu_0 \sqrt{\frac{T}{T_{ref}}} \left(\frac{1 + S_1/T_{ref}}{1 + S_1/T}\right) \quad \text{avec} \quad T_{ref} = 273,15 \text{ K et } S_1 = 110,4 \text{ K.}$$
(2.6)

Le flux de chaleur est écrit selon la loi de Fourier et s'exprime :

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} , \qquad (2.7)$$

où λ est la conductivité thermique qui est fonction de la viscosité, du nombre de Prandtl (égal à $P_r = 0.72$) et de la capacité calorifique à pression constante (C_p) : $\lambda = \mu C_p / P_r$.

Afin de fermer le système d'équations (6 inconnues pour 5 équations), la pression est reliée à la masse volumique et à la température via une loi d'état. Dans un premier temps, la loi d'état utilisée sera celle des gaz parfaits.

$$P = \rho r T$$
 avec $r = C_p - C_v$ (relation de Meyer). (2.8)

 C_p et C_v sont les capacités calorifiques à pression constante et à volume constant (unité J.K⁻¹.kg⁻¹). Le rapport de capacités calorifiques, est égal à $\gamma = C_p/C_v = 1,4$. Enfin pour les gaz parfaits, la vitesse du son est $c = \sqrt{\gamma rT}$.

Dans la section suivante, l'équation d'état évoluera vers une forme prenant en compte les effets de gaz réel. La thermodynamique relative à cet état y sera développée et expliquée.

Les équations de Navier-Stokes font intervenir des dérivées partielles de plusieurs types (première spatiale ou temporelle et seconde en espace). Dans le chapitre consacré aux méthodes numériques, la résolution des différents termes des équations de Navier-Stokes sera abordée.

2.2 Thermodynamique supercritique

2.2.1 Équation d'état de Soave Redlich Kwong

Le domaine d'application de la loi d'état des gaz parfaits se situe loin du point critique où les effets de gaz réels sont négligeables. Dès que les conditions de pression et de température s'approchent des valeurs critiques du gaz, ils ne sont plus négligeables et la loi d'état doit évoluer pour en tenir compte. Dans les travaux sur les canaux avec un fluide dans un état supercritique, la loi choisie est celle de Soave-Redlich-Kwong [36, 37, 96], qui sera notée SRK par la suite. Celle-ci s'exprime ainsi :

$$P = \frac{\rho R_u T}{W - b\rho} - \frac{a\alpha}{W} \frac{\rho^2}{W + b\rho} , \qquad (2.9)$$

où R_u est la constante universelle des gaz (égale à 8,314 J.K⁻¹.mol⁻¹) et W est la masse molaire du gaz. Les constantes 'a' et 'b' prennent en compte, respectivement, les efforts d'attraction et de répulsion entre les molécules. ' α ' est un paramètre fonction de la température et du facteur d'excentricité.

2.2. Thermodynamique supercritique

Dans cette étude, les écoulements considérés mettent en jeu uniquement une seule espèce. Des extensions des expressions présentées existent pour des gaz multi-espèces [66]. Ainsi, on a :

$$a = 0,42747 \frac{R_u^2 T_c^2}{P_c} \tag{2.10}$$

$$b = 0,08664 \ \frac{R_u T_c}{P_c} \tag{2.11}$$

$$\alpha = \left[1 + S\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right]^2 \tag{2.12}$$

$$S = 0,48508 + 1,5517\omega - 0,15613\omega^2 \tag{2.13}$$

où ω , T_c et P_c sont respectivement le facteur d'acentricité, la température critique, et la pression critique de l'espèce concernée. Il fut d'abord utilisé par Pitzer *et al.* [76] dans des travaux sur le facteur de compressibilité. Il prend en compte la caractéristique structurelle de la molécule. Cependant, ces expressions (Eqs. (2.12) et (2.13)) ne peuvent pas décrire correctement le comportement de la molécule H₂. Pour cela, Graboski et Daubert [36] ont proposé une expression spécifique à cette molécule :

$$\alpha_{H_2} = 1,202 \exp\left(-0,30228 \frac{T}{T_c}\right) .$$
(2.14)

2.2.2 Propriétés importantes des fluides en état supercritique

• Facteur de compressibilité :

Un point important des fluides dans un état supercritique est le facteur de compressibilité, noté Z. Il quantifie l'écart à l'hypothèse des gaz parfaits et s'exprime ainsi :

$$Z = \frac{P}{\rho r T} \tag{2.15}$$

Lorsque Z = 1, le fluide satisfait exactement la loi des gaz parfaits $P = \rho rT$. Il est possible d'établir une carte du facteur de compressibilité pour un fluide choisi. Afin d'illustrer ce comportement, le facteur de compressibilité du méthane est tracé sur la Fig. 2.1 pour des pressions allant de 1 à 140 bar et des températures comprises entre 140 et 320 K. Pour calculer Z, il est nécessaire de résoudre l'équation d'état. L'équation d'état SRK est cubique pour la masse volumique et nécessite donc une résolution par la méthode de Cardan [14] décrite dans l'annexe A.

• Propriétés thermodynamiques :

Pour résoudre les équations de Navier-Stokes, il est nécessaire d'établir quelques relations thermodynamiques en prenant en compte les effets de pression [125]. L'énergie interne (E_i) , l'enthalpie (H), et le capacité calorifique à pression constante (C_p) .

$$E_{i}(T,\rho) = E_{i}^{0}(T) + \int_{\rho_{0}}^{\rho} \left[\frac{P}{\rho^{2}} - \frac{T}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right]_{T} d\rho$$

$$H(T,\rho) = H^{0}(T) + \int_{P_{0}}^{P} \left[\frac{1}{\rho} + \frac{T}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{P} \right]_{T} dP$$

$$C_{p}(T,\rho) = C_{v}^{0}(T) + \int_{\rho_{0}}^{\rho} \left[\frac{T}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial^{2} P}{\partial^{2} T} \right)_{\rho} \right]_{T} d\rho + \frac{T}{\rho^{2}} \frac{(\partial P/\partial T)_{\rho}^{2}}{(\partial P/\partial \rho)_{T}}$$



Fig 2.1 – Champ du facteur de compressibilité du CH_4 pour des pressions de 1 à 140 bars et des températures de 140 à 320 K résolue avec l'équation de SRK.

Les dérivées alors introduites dépendent de l'équation d'état considérée. Pour SRK, elles deviennent :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial T} \end{pmatrix}_{\rho} = \frac{\rho R_u}{W - b\rho} - \frac{a\rho^2}{W(W + b\rho)} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_{\rho} \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial \rho} \end{pmatrix}_T = \frac{WTR_u}{(W - b\rho)^2} - \frac{a\alpha}{W} \frac{\rho(2W + b\rho)}{(W + b\rho)^2}$$

Il reste alors à exprimer $(\partial \alpha / \partial T)_o$ qui est, cette fois-ci, dépendante de l'espèce :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \alpha}{\partial T} \end{pmatrix}_{\rho} = \frac{-0.36334}{T_c} \exp\left(-0.30228 \frac{T}{T_c}\right) \text{ pour H}_2 \\ \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T}\right)_{\rho} = \frac{S}{\sqrt{T T_c}} \left[1 + S\left(1 + \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right] \text{ sinon.}$$

2.3 Simulation Numérique Directe (DNS)

La méthode de simulation DNS résout directement les équations de Navier-Stokes présentées précédemment. La grande variété d'échelle spatiale et temporelle présente dans la turbulence requiert un nombre de points conséquent proportionnel à $Re^{9/4}$. Avec les capacités informatiques actuelles, cette approche est limitée à de petites configurations académiques (de l'ordre du millimètre) et de faible nombre de Reynolds (Re < 4000). Cependant elle permet d'obtenir énormément d'informations pour calibrer les modèles de turbulence nécessaires aux méthodes LES et RANS. Pope [79] a illustré ce phénomène en évaluant le coût d'une DNS de turbulence homogène isotrope. Ce type de simulation est défini principalement par trois paramètres :

- le nombre de Reynolds,

- l'énergie cinétique turbulente $k = 1/2u'_i u'_i$,
- la dissipation turbulente $\epsilon = \mu \ \partial^2 u_i / \partial x_i^2$.

Le tableau présenté ci-dessous est obtenu avec les hypothèses suivantes :

- dimension de maille : la moitié de l'échelle de Kolmogorov,
- temps de simulation : 4 temps caractéristiques ($\tau = k/\epsilon$),
- 1000 opérations par cellule et pas de temps,
- une architecture de 1 $Gflop/s^1$.

Re	Ν	T _{cpu}
94	104	20 minutes
375	214	9 heures
1500	498	13 jours
6000	1260	20 mois
24000	3360	90 ans
96000	9218	5 siècles

Tableau 2.1 – Nombre de points par coté du cube (N) et coût CPU d'une DNS de turbulence homogène isotrope en fonction du nombre de Reynolds (Extrait de Pope [79])

La conclusion obtenue est : plus le nombre de Reynolds augmente, plus le temps nécessaire à la résolution de l'écoulement est important et ceci de façon exponentielle.

Parmi les hypothèses, la valeur choisie pour la puissance de crête du processeur est très limitée. Aujourd'hui, les plates-formes massivement parallèles disposent de puissance de crête totale de l'ordre de la centaine de Tflop/s (139 Tflop/s sur la Blue Gene/P Babel (40960 coeurs) disponible à l'IDRIS). En prenant l'exemple avec cette machine, le plus coûteux des calculs du tableau Tab. 2.1 ne prendrait plus que deux semaines environ. Il faut noter que les premières machines pentaflopiques commencent à faire leur apparition (Cray XT5-HE, 2,24 Pflop/s au laboratoire national de Oak Ridge (US)) et permettront de réduire encore le temps nécessaire à des calculs inenvisageables quelques années avant. Une autre discutable hypothèse du raisonnement de Pope est : le nombre d'opération par cellule et par pas de temps. Les codes de calcul dédiés à la DNS disposent de schémas numériques très précis et donc très coûteux afin de pouvoir s'assurer que les plus petites échelles de la turbulence puissent être simulées correctement. Il en résulte que le nombre d'opération prévu est très sous-estimé. Avec une estimation plus correcte du nombre d'opérations, le temps CPU va alors encore augmenter.

De récents exemples (Mizobuchi *et al.* [69], Chen *et al.* [19], Hawkes *et al.* [40, 39] et Lignell *et al.* [61]) avec des nombres de Reynolds relativement élevés (Re_{jet} compris entre 2500 et 13600) montrent les futurs standards de la DNS. Ils vont continuer à évoluer rapidement car de nouvelles générations d'architectures de calcul devraient émerger dans les années à venir tant au niveau des CPU classiques qu'avec les processeurs des cartes graphiques (GPU - Graphics Processing Unit). Ces processeurs proposent aujourd'hui des puissances considérables (3,73 Tflop/s en simple précision

^{1.} Gflop/s : un milliard d'opérations à virgule flottante par seconde.
et 311 Gflop/s en double précision pour la carte Tesla S1070 de NVIDIA²). Cependant cette puissance est difficilement exploitable pour le calcul scientifique car ces processeurs sont très spécialisés et sont relativement peu souples d'utilisation contrairement aux CPU classiques. Il existe cependant quelques études de mécanique des fluides publiées utilisant ce type d'architecture [25, 85].

2.4 Simulation aux Grandes Échelles (LES)

La méthode LES utilise un opérateur de filtrage qui permet de séparer les échelles résolues de celles modélisées. La séparation est souvent fixée par la taille de maille choisie : plus le maillage sera fin, plus les échelles à résoudre seront fines et la modélisation des petites échelles moins cruciale. Ainsi, lorsque la taille de maille tend vers la longueur de l'échelle de Kolmogorov, la résolution LES tend vers une résolution DNS. En pratique, la taille de maille est plus proche de l'échelle de Taylor.

2.4.1 Opérateur de filtrage

Au cours de ce chapitre, la variable Φ , fonction de l'espace et du temps, sera la variable à filtrer. G sera la fonction filtre de taille caractéristique Δ . La variable filtrée est notée $\overline{\Phi}$ et obtenue ainsi :

$$\overline{\Phi}(\vec{x},t) = \int \int \int \Phi(\vec{y},t) G(\vec{x}-\vec{y}) d\vec{y} \quad .$$
(2.16)

Elle correspond au champ résolu. La partie non-résolue, notée $\Phi' = \Phi - \overline{\Phi}$, est le champ de sous-maille. Afin d'assurer un filtrage aisé des équations de Navier-Stokes, l'opérateur de filtrage doit pouvoir commuter avec les opérateurs de dérivation temporelle et spatiale [59]. Cette propriété n'est vérifiée que si le domaine de filtrage est infini et que la taille de filtre est constante et indépendante de l'espace [34]. Toutes ces conditions ne sont pas vérifiées dans la majorité des cas, en particulier à proximité des parois où un raffinement du maillage est nécessaire. Cependant, il est communément admis que les erreurs produites sont négligeables. Il faut également remarquer que cet opérateur ne possède pas les mêmes propriétés que l'opérateur de Reynolds, ainsi :

$$\Phi \overline{\Psi} \neq \overline{\Phi} \ \overline{\Psi} \quad , \qquad \overline{\Phi} \neq \overline{\Phi} \quad , \qquad \overline{\Phi'} \neq 0 \; .$$
 (2.17)

Germano *et al.* [33] ont proposé une taille de filtre caractéristique pour un maillage cartésien non-uniforme : $\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3}$ où Δ_i est la taille de la maille dans la direction *i*.

Dans le cas d'un écoulement compressible, le changement de variable similaire à la moyenne de Favre utilisée pour les modélisations RANS des écoulements compressibles [26, 114, 115] est utilisé et consiste à pondérer la variable par la masse volumique.

$$\overline{\rho}\widetilde{\Phi} = \overline{\rho}\overline{\Phi} \tag{2.18}$$

Comme précédemment, on peut définir le champ de sous-maille de manière analogue $\Phi'' = \Phi - \widetilde{\Phi}$. Cet opérateur de Favre ne commute pas avec les opérateurs de dérivation spatiale et temporelle. Cependant, son utilisation présente deux intérêts :

- l'équation de continuité filtrée ne contient pas de terme de sous-maille;

^{2.} http://www.nvidia.com

 les équations des moments et d'énergie filtrées sont formulées d'une manière analogue aux termes de sous-mailles près.

La moyenne de Favre n'est pas appliquée à la masse volumique, la pression et à la viscosité.

2.4.2 Equations de Navier-Stokes filtrées

Les équations à résoudre sont obtenues en appliquant l'opérateur de filtrage (Eqs. (2.16) et (2.18)) aux équations de Navier-Stokes ainsi qu'à l'équation d'état :

$$\overline{P} = \overline{\rho} r \widetilde{T} \quad , \tag{2.19}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad , \tag{2.20}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{\sigma}_{ij}}{\partial x_i} \quad , \tag{2.21}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{E}_t}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho} (\widetilde{E}_t \widetilde{u}_j + \widetilde{P} \widetilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{\sigma}_{ij} \overline{u}_i}{\partial x_j} \quad . \tag{2.22}$$

Dans les équations présentées ci-dessus, beaucoup de termes ne sont pas résolus directement. Pour cela, les équations sont modifiées de sorte à faire apparaître des termes plus aisément accessibles. Ils sont construits en utilisant les variables résolues pour évaluer la formulation. Par exemple dans l'Eq. (2.21), le terme $\overline{\sigma}_{ij}$ est difficile à évaluer directement au cours du calcul.

$$\overline{\sigma_{ij}} = \overline{\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}}$$
(2.23)

Il est plus simple d'introduire son équivalent aux grandes échelles, $\check{\sigma}_{ij}$, construit suivant la même formulation mais avec les variables filtrées. Ainsi, la différence entre ce nouveau terme et l'ancien correspond à un terme de faible amplitude qui sera modélisé par différentes approches présentées par la suite. En suivant cette procédure pour les termes difficilement accessibles des équations de Navier-Stokes filtrées, on obtient :

$$\frac{\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{u}_{j}}{\partial x_{j}} + A_{1} = -\frac{\partial\overline{P}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial\check{\sigma}_{ij}}{\partial x_{j}} + A_{2} ,$$
avec $A_{1} = \frac{\partial\overline{\rho}(\widetilde{u_{i}u_{j}} - \tilde{u}_{i}\tilde{u}_{j})}{\partial x_{j}}$ et $A_{2} = \frac{\partial(\overline{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij})}{\partial x_{j}} .$

$$(2.24)$$

Pour l'équation de quantité de mouvement, on définit la partie résolue du tenseur des contraintes visqueuses, $\check{\sigma}_{ij}$, comme :

$$\check{\sigma}_{ij} = \mu(\tilde{T}) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu(\tilde{T}) \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} , \qquad (2.25)$$

ainsi que le tenseur de contrainte de sous-maille :

$$\tau_{ij} = \overline{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad . \tag{2.26}$$

Pour l'énergie totale filtrée, E_t , le même procédé est utilisé. Une énergie totale évaluée à partir des valeurs filtrées est construite :

$$\overline{\rho}\check{E}_t = \frac{\overline{P}}{\gamma - 1} + \overline{\rho}(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2) \quad . \tag{2.27}$$

En appliquant les mêmes principes à l'équation Eq. (2.22) que pour les équations de quantité de mouvement, on obtient :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \dot{E}_t}{\partial t} + \frac{\partial (\tilde{u}_j (\overline{\rho} E_t + P))}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j \check{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial \check{q}_j}{\partial x_j} = -B_1 - B_2 - B_3 + B_4 + B_5 - B_6 \quad , \quad (2.28)$$

où les termes de sous-mailles s'expriment comme ci-dessous :

$$B_1 = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{(\overline{Pu}_j - \overline{P}\widetilde{u}_j)}{\partial x_j} \quad , \tag{2.29}$$

$$B_2 = \left(\overline{p\frac{\partial u_j}{\partial x_j}} - \overline{p}\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_j}\right) \quad , \tag{2.30}$$

$$B_3 = \tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad , \tag{2.31}$$

$$B_4 = \overline{\sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \overline{\sigma}_{ij} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} \quad , \tag{2.32}$$

$$B_5 = \frac{\partial(\tilde{u}_i(\bar{\sigma}_{ij} - \check{\sigma}_{ij}))}{\partial x_j} \quad , \tag{2.33}$$

$$B_6 = \frac{\partial(\bar{q}_j - \check{q}_j)}{\partial x_i} \quad . \tag{2.34}$$

Les travaux de Vreman *et al.* [114] ont permis de simplifier les équations en analysant les importances relatives de chacun des termes A_i et B_i (Tab. 2.2). De nombreux

importance relative	terme de sous-maille
grande (\approx convection)	-
moyenne (\approx diffusion)	A_1, B_1, B_2, B_3
petite	B_4
négligeable	A_2, B_5, B_6

Tableau 2.2 – Tableau des importances relatives des différents termes de sous-mailles.

auteurs (Erlebacher *et al.* [26], Moin *et al.* [70], et Vreman *et al.* [115]) supposent, grâce à l'hypothèse d'incompressibilité des petites échelles, que les variations de Mach restent faibles dans la sous-maille. Ainsi, le terme de pression-dilatation, B_2 , est négligé. Seuls les termes A_1 , B_1 et B_3 (Tab. 2.2) sont à modéliser par différentes approches abordées dans les paragraphes suivants.

2.4.3 Modèles de sous-mailles aérodynamiques

Approche constante : modèle de Smagorinsky

Ce modèle fut présenté par Smagorinsky [94] pour un écoulement incompressible en 1963. Le concept de cette approche est basé sur le transfert d'énergie entre les grandes échelles (résolues) et les plus petites échelles (non-résolues). Ainsi, la turbulence de sous-maille est considérée comme un phénomène dissipatif et est modélisée en reliant proportionnellement le tenseur des contraintes de sous-mailles (τ_{ij}) et la partie symétrique du tenseur de Reynolds (S_{ij}) . Le coefficient de proportionnalité est appelé la viscosité turbulente (μ_t) :

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk} = -2\mu_t(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3}\widetilde{S_{kk}}\delta_{ij})$$
(2.35)

où

$$\widetilde{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$
(2.36)

La viscosité turbulente s'exprime ainsi :

$$\mu_t = \overline{\rho} C_s \Delta^2 |\widetilde{S}| \quad \text{avec} \quad |\widetilde{S}| = \left(2\widetilde{S_{ij}}\widetilde{S_{ij}}\right)^{\frac{1}{2}} \quad . \tag{2.37}$$

Afin d'étendre le champ d'application aux écoulements compressibles, Yoshisawa [122] a proposé un modèle pour la trace du tenseur des contraintes de sous-mailles (τ_{kk}) .

$$\tau_{kk} = 2\overline{\rho}C_I \Delta^2 |\tilde{S}| \tag{2.38}$$

Les coefficients C_s et C_I sont constants. Les valeurs les plus classiquement considérées sont $C_s = 0.04$ et $C_I = 0.005$. L'utilisation de coefficients constants rend la formulation moins précise et moins polyvalente.

Approche dynamique : modèle de Germano-Lilly

L'approche exposée dans ce paragraphe se base sur la connaissance des grandes échelles pour évaluer les flux de sous-mailles. Le principe revient à considérer la superposition de deux champs de variables connues, l'un issu du calcul et l'autre d'un moyennage spatial à une échelle supérieure du précédent champ. Ainsi, il est possible d'évaluer les constantes de sous-mailles C_s et C_I à partir de la connaissance de ces deux champs. Ces constantes adoptent alors des variations spatio-temporelles car elles sont évaluées à partir des champs instantanés. Cette propriété rend aisée la résolution précise d'écoulement présentant de fortes instationnarités. Cette approche est plus générale que la méthode de Smagorinsky présentée auparavant.

En pratique, l'opération de moyennage spatial de la solution instantanée revient à découper le spectre à une échelle supérieure notée 'test', donc à un nombre d'onde plus petit (Fig. 2.2). Cette opération de filtrage test, notée î, est en fait une opération de filtrage se basant sur un filtre plus large $\hat{\Delta}$. Dans les études à venir le rapport $\hat{\Delta}/\Delta$ est égal à 2. De précédentes études montrent une faible sensibilité à ce rapport [33, 70]. Historiquement, le premier modèle de sous-maille, basé sur cette approche dynamique, a été proposé par Germano *et al.* [33] pour un fluide incompressible. L'extension au fluide compressible a été apportée par Moin *et al.* [70]. C'est le modèle de sous-maille dans sa version pour les fluides compressibles qui est présenté dans la suite.

La première étape passe par l'écriture du tenseur des contraintes de sous-maille au niveau test par analogie à celui écrit classiquement (Eq. (2.26)) :

$$T_{ij} = \widehat{\overline{\rho u_i u_j}} - \frac{\widehat{\overline{\rho u_i}}}{\widehat{\overline{\rho}}} \quad . \tag{2.39}$$

On introduit ensuite le tenseur de Léonard L_{ij} à l'aide des équations (2.26) et (2.39).

$$L_{ij} = T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}} = \left(\frac{\widehat{\overline{\rho u_i}} \ \overline{\rho u_j}}{\overline{\rho}}\right) - \left(\frac{\widehat{\overline{\rho u_i}} \ \widehat{\overline{\rho u_j}}}{\overline{\overline{\rho}}}\right) = (\widehat{\overline{\rho u_i} u_j}) - \frac{\overline{\overline{\rho u_i}} \ \overline{\overline{\rho u_j}}}{\overline{\overline{\rho}}} \quad .$$
(2.40)



Fig 2.2 – Spectre d'énergie : principe de l'approche dynamique. (Figure tirée de Blin, 1999 [7])

De par sa formulation, le tenseur L_{ij} est entièrement connu, car évalué à partir de valeurs résolues. En poursuivant l'analogie qui a permis de construire T_{ij} , il est possible de construire une formulation pour le fermer de façon analogue à celle utilisée pour le tenseur des contraintes de sous-mailles, τ_{ij} (Eqs. (2.35) et (2.37)).

$$T_{ij} - \frac{1}{3}T_{kk}\delta_{ij} = -2C_s\widehat{\overline{\rho}}\widehat{\Delta}^2|\widehat{\widetilde{S}}|(\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \frac{1}{3}\widehat{\widetilde{S}_{kk}}\delta_{ij})$$
(2.41)

$$T_{kk} = 2C_I \widehat{\rho} \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|^2 \tag{2.42}$$

A l'aide de ces deux expressions, il est possible d'évaluer le tenseur de Leonard (L_{ij}) .

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} = C_s \left[-2C_s \widehat{\overline{\rho}} \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| (\widehat{\widetilde{S}_{ij}} - \frac{1}{3} \widehat{\widetilde{S}_{kk}} \delta_{ij}) + 2\Delta^2 \left(\left(\widehat{\overline{\rho}} |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{ij}} \right) - \frac{1}{3} \left(\widehat{\overline{\rho}} |\widehat{\widetilde{S}}| \widehat{\widetilde{S}_{kk}} \right) \delta_{ij} \right) \right]$$

$$(2.43)$$

$$L_{kk} = 2C_I \left[\widehat{\overline{\rho}} \widehat{\Delta}^2 | \widehat{\widetilde{S}} |^2 - \Delta^2 \left(\widehat{\overline{\rho}} | \widehat{\widetilde{S}} |^2 \right) \right]$$
(2.44)

Une écriture contractée est utilisée pour résumer ces expressions.

$$L_{ij}^{C_s} = C_s M_{ij}^{C_s} (2.45)$$

$$L_{kk} = C_I M_{kk}^{C_I} \tag{2.46}$$

Il est à noter que le système d'équations (2.45) et (2.46) est surdéterminé, car il n'y a qu'une inconnue C_s pour six équations. Une minimisation de l'erreur commise $(E_{ij} = L_{ij}^{C_s} - C_s M_{ij}^{C_s})$ par la méthode des moindres carrés est choisie par Germano et al. [33] et Lilly [62] pour déterminer la constante C_s . On définit alors la somme des carrés, $\Gamma = E_{ij}E_{ij}$. Le développement du produit donne :

$$\Gamma = L_{ij}^{C_s} L_{ij}^{C_s} - 2C_s L_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s} + C_s^2 M_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s} \quad .$$
(2.47)

La recherche de l'erreur minimum revient à la recherche d'un minimum de Γ . Pour cela, il faut que $\partial^2 \Gamma / \partial C_s^2 > 0$. Cette condition est satisfaite si la dérivée première de Γ est nulle. On obtient ainsi :

$$C_s = \frac{L_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s}}{M_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s}} \quad .$$
 (2.48)

En appliquant la même procédure pour la constante C_I , on obtient :

$$C_I = \frac{L_{kk}}{M_{kk}^{C_I}} \quad . \tag{2.49}$$

La relation obtenue ne donne aucune propriété particulière à la constante C_s et peut prendre localement des valeurs négatives, nulles, voire indéterminées si le dénominateur s'annule. Afin de remédier à ces éventuels problèmes pouvant conduire à la divergence des calculs, les solutions suivantes sont souvent utilisées.

La première solution consiste à moyenner la constante suivant une direction homogène de l'écoulement. Les constante C_s et C_I s'expriment alors ainsi :

$$C_s = \frac{\left\langle L_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s} \right\rangle_z}{\left\langle M_{ij}^{C_s} M_{ij}^{C_s} \right\rangle_z} \quad \text{et} \quad C_I = \frac{\left\langle L_{kk} \right\rangle_z}{\left\langle M_{kk}^{C_I} \right\rangle_z} , \qquad (2.50)$$

en notant $\langle . \rangle_z$ la moyenne suivant la direction homogène.

Une autre solution consiste à borner les constantes dans des plages de valeurs permettant un bon déroulement du calcul. Dans les simulations présentées dans la suite, les deux types de limiteurs sont activés. Les constantes sont bornées aux valeurs positives et moyennées dans la direction homogène.

2.4.4 Modèles de sous-mailles thermiques

Approche à Pr_t constant

L'hypothèse supposant la proportionnalité entre le transfert d'énergie entre les grandes échelles et petites échelles et le gradient de température résolue est aujourd'hui unanimement reconnue. Pour modéliser le terme de sous-maille, le concept de 'viscosité turbulente' est conservé et appliqué pour obtenir une viscosité 'thermique'.

$$B_1 = q_k = -\frac{\mu_t c_p}{P r_t} \frac{\partial T}{\partial x_j}$$
(2.51)

Dans le cas de la modélisation à Pr_t constant, celui-ci est pris égal à 0,72.

Approche à Pr_t dynamique

Cette approche est basée sur le même concept dynamique que le modèle Germano & Lilly (voir ci-dessus). Elle a été proposée par Moin *et al.* [70]. Il s'agit ici de

construire un modèle de fermeture pour le terme de flux de chaleur de sous-maille B_1 . Son expression est donnée par :

$$B_1 = q_k = \overline{\rho u_k T} - \frac{\overline{\rho u_k}}{\overline{\rho}} \overline{\rho T} = -\frac{\mu_t c_p}{P r_t} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_j} \quad . \tag{2.52}$$

En reprenant la même procédure développée précédemment, on peut définir le flux thermique de sous-maille au niveau 'test' de la manière suivante :

$$Q_k = \widehat{\overline{\rho u_k T}} - \frac{\widehat{\overline{\rho u_k T}}}{\widehat{\overline{\rho}}} \quad . \tag{2.53}$$

Il peut aussi être exprimé comme pour la formulation à Pr_t constant :

$$Q_k = -\frac{C_s \widehat{\overline{\rho}} \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}|}{P r_t} \frac{\partial \widehat{\widetilde{T}}}{\partial x_k} \quad . \tag{2.54}$$

En continuant le cheminement, on arrive à exprimer l'équivalent thermique du tenseur de Léonard.

$$L_k^{th} = Q_k - q_k = \left(\frac{\overline{\rho u_k}}{\overline{\rho}}\right) - \frac{\widehat{\rho u_k}}{\overline{\overline{\rho}}} - \frac{\widehat{\rho u_k}}{\overline{\overline{\rho}}}$$
(2.55)

Après quelques simplifications, ${\cal L}^{th}_k$ devient :

$$L_k^{th} = \widehat{\overline{\rho}\widetilde{u_k}}\widetilde{\widetilde{T}} - \frac{\widehat{\overline{\rho}\widetilde{u_k}}}{\widehat{\overline{\rho}}} \overline{\widetilde{\rho}} \qquad (2.56)$$

A l'aide des équations (2.52) et (2.54), on obtient :

$$L_k^{th} = -\frac{C_s}{Pr_t} \left(\widehat{\overline{\rho}} \widehat{\Delta}^2 |\widehat{\widetilde{S}}| \frac{\partial \widehat{\widetilde{T}}}{\partial x_k} - \left(\Delta^2 \overline{\overline{\rho}} |\widetilde{S}| \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_k} \right) \right) \quad . \tag{2.57}$$

De la même manière que pour le modèle de Germano-Lilly, on remarque que le système est surdéterminé. Pour lever cette surdétermination, l'expression est contractée à l'aide de $\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_k}$. On peut ainsi en déduire le nombre de Prandtl turbulent.

$$Pr_{t} = C_{s} \frac{\widehat{\overline{\rho}}\widehat{\Delta}^{2}|\widehat{\widetilde{S}}|_{\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_{k}}}\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_{k}} - \left(\widehat{\Delta^{2}\overline{\rho}}|\widetilde{\widetilde{S}}|_{\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_{k}}}\right)\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_{k}}}{\left(\frac{\widehat{\overline{\rho}}\widehat{u_{k}}}{\widehat{\overline{\rho}}} - \widehat{\overline{\rho}}\widehat{u_{k}}\widetilde{\widetilde{T}}\right)\frac{\partial\widetilde{T}}{\partial x_{k}}}$$
(2.58)

Il est également conseillé d'appliquer un opérateur de moyenne suivant une direction homogène. On obtient ainsi :

$$Pr_{t} = C_{s} \frac{\left\langle \widehat{\overline{\rho}} \widehat{\Delta}^{2} | \widehat{\widetilde{S}} | \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_{k}} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_{k}} - \left(\widehat{\Delta^{2} \overline{\rho}} | \widehat{\widetilde{S}} | \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_{k}} \right) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_{k}} \right\rangle_{z}}{\left\langle \left(\frac{\widehat{\overline{\rho}} \widehat{u_{k}}}{\widehat{\overline{\rho}}} - \widehat{\overline{\rho}} \widehat{u_{k}} \widehat{\widetilde{T}} \right) \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_{k}} \right\rangle_{z}} \quad .$$
(2.59)

Méthodes numériques

Sommaire

3.1	Code	e CHOC-WAVES	35
	3.1.1	Discrétisation des termes convectifs : principe du schéma	
		WENO	35
	3.1.2	Amélioration du schéma WENO5	39
	3.1.3	Discrétisation des termes diffusifs	42
	3.1.4	$Discrétisation \ temporelle \ \ \ldots $	44
	3.1.5	Validations 1D et 2D	45
3.2	Code	PPMBFS	51
	3.2.1	Propriétés thermodynamiques	53
	3.2.2	Discrétisation temporelle et préconditionnement	55
	3.2.3	Discrétisation des termes convectifs	57

Ce chapitre présente brièvement les deux codes de calcul utilisés dans cette étude. Il s'agit du code CHOC-WAVES (Compressible High-Order Code using Weno AdaptatiVE Stencils) développé au CORIA par l'équipe du professeur Hadjadj et le code PPMBFS (Preconditionned Parallel Multi Bloc Flow Solver) développé à l'université de Pennsylvanie (USA) par l'équipe du professeur Vigor Yang. Les schémas numériques utilisés dans les deux codes de calcul utilisés (CHOC-WAVES et PPMBFS) seront présentés et une grande attention sera apportée aux calculs des flux convectifs avec la méthode WENO à cause des très forts gradients rencontrés dans les écoulements étudiés. La qualité des schémas de type WENO sera testée sur des écoulements où des chocs vont interagir avec les parois solides, ou dans le cas de variations de masse volumique.

3.1 Code CHOC-WAVES

3.1.1 Discrétisation des termes convectifs : principe du schéma WENO

Ce code de calcul utilise un solveur basé sur un schéma WENO [44, 63, 90] (Weighted Essentially Non-Oscillatory) d'ordre 5, réputé pour être très robuste aux voisinages des discontinuités (ondes de choc, interfaces, ...), tout en offrant des solutions précises dans les régions situées loin de celles-ci. Ce code a déjà fait l'objet de plusieurs validations, en particulier une LES supersonique, en présence d'interactions onde de choc/couche limite [24] et de l'étude du couplage fluide/structure [74] sur des architectures parallèles grâce à l'utilisation de la bibliothèque de MPI.

Le principe des schémas WENO repose sur une reconstruction des flux à l'interface entre deux points voisins (par exemple entre le point i et le point en i + 1), via une combinaison convexe et non-linéaire d'un ensemble de groupes de points, appelé «sub-stencil », dont le nombre détermine la précision globale du solveur et



Fig 3.1 – Différents sub-stencils utilisés pour le schéma WENO5.

l'ensemble constitue le stencil du schéma. Par exemple, le WENO 5 utilise trois sub-stencils, contenant trois points chacun (voir Fig. 3.1), avec des coefficients de pondération, qui sont fonction de la raideur locale de la solution. Ces coefficients sont construits pour favoriser les sub-stencils où la solution est la moins raide.

La propriété de décentrement intrinsèque requiert le passage dans l'espace caractéristique. En effet, le fait de traiter les ondes plutôt que les variables conservatives permet de tenir compte du sens de propagation de l'information, tout en respectant le caractère hyperbolique des équations d'Euler.

Pour détailler le passage des variables conservatives aux variables caractéristiques, l'équation d'Euler monodimensionnelle servira d'exemple.

Passage aux variables caractéristiques

Le vecteur des variables conservatives sera noté W, celui des variables primitives V, et le flux des variables conservatives F. Ils s'expriment respectivement par $(\rho, \rho U, \rho E_t)$, (ρ, U, P) , et $(\rho U, \rho U^2 + P, (\rho E_t + P)U)$. Les équations d'Euler 1D instationnaires s'écrivent alors :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \tag{3.1}$$

Les variables primitives sont introduites dans l'Eq. (3.1) de la façon suivante :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial x} = 0$$
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial x} = 0$$
$$\frac{\partial W}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial W} \frac{\partial W}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial x} = 0$$

Avec les matrices Jacobiennes $M = \frac{\partial W}{\partial V}$ et $B = \frac{\partial F}{\partial V}$, on a alors :

$$\frac{\partial V}{\partial t} + M^{-1}BM^{-1}M\frac{\partial V}{\partial x} = 0 \tag{3.2}$$

Les matrices Jacobiennes M et B s'expriment avec les variables connues :

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial \rho}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial \rho}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \\ \frac{\partial \rho U}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial \rho U}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial \rho U}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \\ \frac{\partial \rho E_t}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial \rho E_t}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial \rho E_t}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ U & \rho & 0 \\ \frac{U^2}{2} & \rho U & \frac{1}{\gamma - 1} \end{pmatrix}$$

 et

$$B = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho U}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial \rho U}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial \rho U}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \\ \frac{\partial \rho U^2 + P}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial \rho U^2 + P}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial \rho U^2 + P}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \\ \frac{\partial (\rho E_t + P) U}{\partial \rho} \Big|_{U,P} & \frac{\partial (\rho E_t + P) U}{\partial U} \Big|_{\rho,P} & \frac{\partial (\rho E_t + P) U}{\partial P} \Big|_{U,\rho} \end{pmatrix}$$
$$B = \begin{pmatrix} U & \rho & 0 \\ U^2 & 2\rho U & 1 \\ \frac{U^3}{2} & \rho E_t + P + \rho U^2 & (\frac{1}{\gamma - 1} + 1) U \end{pmatrix}$$

On note $A = BM^{-1}$ et $\widetilde{A} = M^{-1}BM^{-1}M$. Avec $c = \sqrt{\gamma P/\rho}$, \widetilde{A} devient :

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} U & \rho & 0 \\ 0 & U & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho c^2 & U \end{pmatrix}$$

Le passage aux variables caractéristiques s'effectue par la projection du vecteur des variables primitives dans la base des vecteurs propres de la matrice \widetilde{A} . Pour cela, on définit la base constituée des vecteurs propres suivants :

$$V_1 = \begin{pmatrix} 1\\0\\\frac{-1}{c^2} \end{pmatrix} , \quad V_2 = \begin{pmatrix} 0\\1\\\frac{1}{\rho c} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad V_3 = \begin{pmatrix} 0\\1\\\frac{-1}{\rho c} \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de \widetilde{A} sont alors :

$$\lambda_1 = U$$
 , $\lambda_2 = U + c$ et $\lambda_3 = U - c$.

On réécrit alors $\widetilde{A}=P^{-1}\Lambda P$ avec :

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{-1}{c^2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{\rho c} \\ 0 & 1 & \frac{-1}{\rho c} \end{pmatrix} , \quad P = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\rho}{2c} & \frac{-\rho}{2c} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & \frac{\rho c}{2} & \frac{-\rho c}{2} \end{pmatrix}$$

et
$$\Lambda = \begin{pmatrix} U & 0 & 0 \\ 0 & U + c & 0 \\ 0 & 0 & U - c \end{pmatrix}$$

Ainsi, l'Eq. (3.2) devient :

$$\frac{\partial V}{\partial t} + P^{-1}\Lambda P \frac{\partial V}{\partial x} = 0 . aga{3.3}$$

Le vecteur des variables caractéristiques est la projection du vecteur des variables primitives dans l'espace caractéristique et s'exprime ainsi Z = PV. L'équation d'Euler 1D pour les variables caractéristiques s'écrit alors :

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial Z}{\partial x} = 0 . \qquad (3.4)$$

Une fois dans cet espace de variables, le flux aux interfaces peut être évalué avec la méthode WENO.

Reconstruction WENO

La dérivée spatiale de Eq. (3.4) est évaluée par :

$$\frac{\partial Z}{\partial x} = \frac{Z_{i-1/2} - Z_{i+1/2}}{\Delta x} \tag{3.5}$$

où ${\cal Z}$ représente le flux convectif.

Chaque flux caractéristique $Z_{i\pm 1/2}$ est décomposé en deux parties : une positive $Z^+_{i\pm 1/2}$ et une négative $Z^-_{i\pm 1/2}$ tel que :

$$\frac{\partial Z_{i+1/2}^+(u_{i+1/2})}{\partial u_{i+1/2}} \ge 0 \quad \text{et} \ \frac{\partial Z_{i+1/2}^-(u_{i+1/2})}{\partial u_{i+1/2}} \le 0 \ . \tag{3.6}$$

Ces décompositions peuvent être faites grâce aux schémas de Lax ou de Roe :

– Décomposition de Lax :

$$Z_{i\pm 1/2}^{\pm}(u_{i\pm 1/2}) = \frac{1}{2} \left(Z_{i\pm 1/2}(u_{i\pm 1/2}) \pm \alpha u_{i\pm 1/2} \right)$$
(3.7)

avec α le maximum de la valeur propre concernée sur la ligne de maillage de calcul.

- Décomposition de Roe :

$$Z_{i\pm 1/2}^{\pm}(u_{i\pm 1/2}) = \frac{1}{2} \left(Z_{i\pm 1/2}(u_{i\pm 1/2}) \pm sgn(\lambda u_{i\pm 1/2}) \right)$$
(3.8)

Le flux total est alors la somme du flux positif, $Z_{i+1/2}^+$, et du flux négatif, $Z_{i+1/2}^-$.

$$Z_{i+1/2} = Z_{i+1/2}^+ + Z_{i+1/2}^-$$
(3.9)

Le flux caractéristique $Z_{i+1/2}^+$ (ou $Z_{i+1/2}^-$) est calculé à l'aide de l'interpolation du flux sur les sub-stencils. Pour le calcul de $Z_{i+1/2}^+$ avec le WENO5, on utilise les trois sub-stencils suivants :

$$S_0 = \{i - 2, i - 1, i\}$$
, $S_1 = \{i - 1, i, i + 1\}$ et $S_2 = \{i, i + 1, i + 2\}$ (3.10)

Pour un flux calculé en i+1/2, on remarque que la position du stencil est légèrement décalée vers l'amont (Fig. 3.1) rendant le schéma plus robuste, mais aussi un peu plus dissipatif. La reconstruction du flux $Z_{i+1/2}^+$ s'organise de la façon suivante :

$$Z_{i+1/2}^{+} = \sum_{k=0}^{2} w_{(k)} Z_{i+1/2}^{(k)+}$$
(3.11)

où $Z_{i+1/2}^{(k)+}$ correspond à l'interpolation du flux sur le sub-stencil « k » :

$$\begin{cases} Z_{i+1/2}^{(0)+} &= \frac{11}{6}Z_{i-2}^{+} - \frac{7}{6}Z_{i-1}^{+} + \frac{2}{6}Z_{i}^{+} \\ Z_{i+1/2}^{(1)+} &= \frac{2}{6}Z_{i-1}^{+} + \frac{5}{6}Z_{i}^{+} - \frac{1}{6}Z_{i+1}^{+} \\ Z_{i+1/2}^{(2)+} &= -\frac{1}{6}Z_{i}^{+} + \frac{5}{6}Z_{i+1}^{+} + \frac{2}{6}Z_{i+2}^{+} \end{cases}$$

Comme énoncé précédemment, les schémas de type WENO disposent de la propriété de se décentrer à proximité de discontinuités. Elle provient du calcul des coefficients non-linéaires de pondération, $w^{(k)}$, qui sont évalués ainsi :

$$w^{(k)} = \frac{\sigma^{(k)}}{\sum_{l=0}^{2} \sigma^{(l)}}$$
 avec $\sigma^{(k)} = \frac{\Omega^{(k)}}{[\epsilon + \beta^{(k)}]^2}.$

Les coefficients $\Omega^{(k)}$ sont les coefficients dits optimaux. Dans les zones sans discontinuités fortes, la pondération entre les sub-stencils est très proche de ces coefficients. Pour le WENO5, ces coefficients linéaires prennent les valeurs $\Omega^{(0)} = 1/10$, $\Omega^{(1)} = 6/10$, et $\Omega^{(2)} = 3/10$. Les indicateurs de discontinuités, $\beta^{(k)}$, sont donnés par :

$$\begin{cases} \beta^{(0)} = \frac{13}{12}(Z_{i-2} - 2Z_{i-1} + Z_i)^2 + \frac{1}{4}(Z_{i-2} - 4Z_{i-1} + 3Z_i)^2 \\ \beta^{(1)} = \frac{13}{12}(Z_{i-1} - 2Z_i + Z_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(Z_{i-1} - Z_{i+1})^2 \\ \beta^{(2)} = \frac{13}{12}(Z_i - 2Z_{i+1} + Z_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3Z_i - 4Z_{i+1} + Z_{i+2})^2 \end{cases}$$

On remarque que dans les zones où Z_i est quasiment constant, les $\beta^{(k)}$ sont presque nuls et ainsi les $w^{(k)}$ sont presque égaux aux $\Omega^{(k)}$. Avant d'achever le calcul du flux au point i + 1/2, il convient de déterminer sa partie négative, $Z_{i+1/2}^-$. Celui-ci se calcule de la même manière que le flux positif, en effectuant simplement une symétrie par rapport au point i + 1/2.

Une fois les deux flux caractéristiques calculés, le flux numérique total est obtenu par simple sommation :

$$Z_{i+1/2} = Z_{i+1/2}^+ + Z_{i+1/2}^-$$
(3.15)

Le flux physique est obtenu par multiplication avec la matrice de passage entre ces deux espaces, $V = P^{-1}Z$. Il est possible également de remonter aux variables conservatives avec les matrices M^{-1} et $W = M^{-1}P^{-1}Z$.

3.1.2 Amélioration du schéma WENO5

De par leur construction et malgré leur grande précision, les schémas WENO produisent de la dissipation numérique dans des zones à faible gradient : les indicateurs de discontinuités ne sont jamais strictement nuls. Dans ce cas, l'emploi de ces schémas pour des simulations numériques directes (DNS) ne sera possible qu'après quelques améliorations. Elles ont pour objectif d'accroître la précision tout en préservant leur robustesse. Les points principaux d'optimisation sont les coefficients linéaires, les indicateurs de décentrement, et la disposition des stencils. Le premier est très souvent abordé car il conditionne la qualité spectrale du schéma. Le résultat de cette optimisation n'est pas universel car il dépend très fortement des contraintes imposées à l'algorithme d'optimisation [65, 77]. Les indicateurs de décentrement jouent aussi un rôle prépondérant dans le comportement du schéma car ils conditionnent l'écart à l'optimum possible.

Pour cela, nous nous proposons dans un premier temps d'adopter les modifications, proposées par Martín *et al.* [65] en ajoutant un sub-stencil supplémentaire, le but étant de symétriser le plus possible le calcul des flux à l'interface. Néanmoins, il faut noter que cette modification reste insuffisante, car même si les sub-stencils sont disposés quasiment centrés autour de l'interface, les coefficients optimaux de pondération sont calculés de sorte à rendre le schéma décentré en amont. La figure suivante illustre la répartition des quatre sub-stencils utilisés pour le calcul du flux $Z_{i+1/2}^+$.



Fig 3.2 – Stencils pour le schéma WENO5 bande large à coefficients optimisés.

La nouvelle formulation de reconstruction du flux est donnée par :

$$Z_{i+1/2}^{+} = \sum_{k=0}^{3} w^{(k)} f_{i+1/2}^{(k)+} \quad \text{où} \quad w^{(k)} = \frac{\sigma^{(k)}}{\sum_{l=0}^{3} \sigma^{(l)}}$$

avec
$$\sigma^{(k)} = \frac{\Omega^{(k)}}{[\epsilon + \beta^{(k)}]^2} \quad (3.16)$$

Les coefficients linéaires de cette nouvelle disposition de sub-stencils sont :

$$\begin{cases} \Omega^{(0)} = 1/20 & \Omega^{(1)} = 9/20 \\ \Omega^{(2)} = 9/20 & \Omega^{(3)} = 1/20 \end{cases}$$

Les coefficients linéaires de pondération proposés par Martín *et al.* [65] sont optimisés pour étendre la largeur spectrale du schéma.

Les coefficients linéaires optimisés proposés par Martín et al. [65] sont :

$$\begin{array}{l} \Omega^{(0)} = 0,094647545896 \quad \Omega^{(1)} = 0,428074212384 \\ \Omega^{(2)} = 0,408289331408 \quad \Omega^{(3)} = 0,068988910311 \end{array}$$

Ces valeurs sont fortement liées aux paramètres de la méthode de minimisation [116, 104, 64] et ne sont donc pas universelles.

Les indicateurs de décentrement, $\beta^{(k)}$, deviennent :

$$\begin{cases} \beta^{(0)} = \frac{13}{12}(Z_{i-2} - 2Z_{i-1} + Z_i)^2 + \frac{1}{4}(Z_{i-2} - 4Z_{i-1} + 3Z_i)^2 \\ \beta^{(1)} = \frac{13}{12}(Z_{i-1} - 2Z_i + Z_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(Z_{i-1} - Z_{i+1})^2 \\ \beta^{(2)} = \frac{13}{12}(Z_i - 2Z_{i+1} + Z_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3Z_i - 4Z_{i+1} + Z_{i+2})^2 \\ \beta^{(3)} = \frac{13}{12}(Z_{i+1} - 2Z_{i+2} + Z_{i+3})^2 + \frac{1}{4}(5Z_{i+1} - 8Z_{i+2} + 3Z_{i+3})^2 \\ \text{avec} \qquad \beta^{(3)} = \max_{0 \le k \le 3} \beta^{(k)} \qquad \text{pour préserver la stabilité numérique.} \end{cases}$$

Comme mentionné précédemment, le méthodologie WENO permet d'ajuster, de façon dynamique, la précision locale en présence, ou non, de discontinuités. Or, ce schéma est capable de supporter des perturbations de faibles amplitudes sans avoir besoin de dégrader partiellement la précision. Partant de ce constat, Taylor *et al.* [105] ont récemment effectué une étude sur l'emploi de limiteurs, autorisant l'usage du schéma à son optimum (utiliser les coefficients linéaires en lieu et place des coefficients non-linéaires) tant que la solution locale le permet (faible variation relative des

valeurs sur le stencil), sinon de laisser le schéma suivre son fonctionnement naturel sur le reste du domaine.

Pour cela, trois types de limiteur ont été proposés, à savoir un limiteur absolu, un limiteur relatif et un troisième limiteur basé sur la variation totale (TV) d'une quantité de flux donnée. Le premier limiteur étant très dépendant du type de simulation et peu généralisable, il n'est pas retenu. Le second est moins dépendant, mais reste néanmoins assez difficile d'utilisation, comparé au dernier qui offre un meilleur compromis. Notre choix s'est donc porté sur ce dernier limiteur qui a fait l'objet d'une intégration numérique dans le code de calcul.

Ainsi, la détermination de ce limiteur se fait en trois étapes :

– Calcul de la variation totale sur chacun des sub-stencils :

 $TV_k = |Z_{i+k-1} - Z_{i+k-2}| + |Z_{i+k} - Z_{i+k-1}|$

– Calcul de la variation relative sur l'ensemble des stencils : $R(TV) = \frac{\max_{k=0,3}(TV_k)}{\epsilon + \min_{k=0,3}(TV_k)}$

$$\omega^{(k)} = \begin{cases} \Omega^{(k)} &, \text{ si } R(TV) < \alpha_{RL}^{TV} & \text{with } \alpha_{RL}^{TV} = 5\\ \omega^{(k)} &, \text{ sinon} \end{cases}$$

Les travaux présentés en [105] fixent le seuil du limiteur à $\alpha_{RL}^{TV} = 5$, selon une étude paramétrique de la variation de R(TV). Par la suite, cette variante du schéma WENO5 sera notée WENO5-SOL, pour Symmetry - Optimized - Limiter.

Analyse spectrale

L'étude spectrale d'un schéma numérique peut donner de précieuses informations sur sa précision théorique. Le principe est d'analyser la différence de réponse de la dérivée première d'une fonction harmonique f de nombre d'onde k (Eq. 3.20)obtenue avec le schéma numérique, d'une part, et celle obtenue de manière analytique, d'autre part.

$$f(x) = e^{ikx} aga{3.20}$$

Sa dérivée première s'exprime de manière analytique ainsi :

$$f'(x) = \imath k e^{\imath k x} = \imath k f(x) . \tag{3.21}$$

En supposant utiliser un maillage de taille constante Δ , on a :

$$f(x+n\Delta) = e^{ik(x+n\Delta)} = e^{ikn\Delta}f(x) . \qquad (3.22)$$

Pour les schémas aux différences finies, la dérivée première, notée f'_{DF} , est exprimée avec les points voisins. De manière générale, elle peut être exprimée ainsi :

$$f'_{DF}(x) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n} a_n f(x + n\Delta) . \qquad (3.23)$$

Les coefficients a_n dépendent de l'ordre et de la formulation de la dérivée numérique. L'Eq. (3.23) devient alors pour une fonction harmonique simple (Eq. (3.20)).

$$f'_{DF}(x) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n} a_n e^{ikn\Delta} f(x) . \qquad (3.24)$$

Avec les Eqs. (3.21) et (3.24), on obtient :

$$ikf(x) = \frac{1}{\Delta} \sum_{n} a_n e^{ikn\Delta} f(x) . \qquad (3.25)$$

Et un nombre d'onde modifié \tilde{k} peut être défini :

$$i\widetilde{k} = \frac{1}{\Delta} \sum_{n} a_n e^{ikn\Delta}$$
(3.26)

Il est possible de normaliser l'Eq. (3.26) par Δ en posant $\kappa = \Delta k$.

$$i\widetilde{\kappa} = \sum_{n} a_n e^{in\kappa} . \tag{3.27}$$

Pour un schéma spectral (*i.e.* étude dans l'espace fréquentiel après projection du signal sur une base polynomiale [35]), le nombre d'onde modifié $\tilde{\kappa}$ est égal à κ . Cependant pour des schémas aux différences finies, κ est une approximation de $\tilde{\kappa}$. En analysant l'Eq. (3.27), on remarque que $\tilde{\kappa}$ est un nombre complexe. Sa partie réelle décrit l'erreur de phase (nulle pour un schéma centré), et sa partie imaginaire décrit l'erreur d'amplitude. Les Figs. 3.3(a) et 3.3(b) représentent la réponse de différents schémas numériques en fonction du nombre d'onde de la fonction de test. Le résultat obtenu confirme bien que les améliorations (coefficients optimisés et sub-stencil supplémentaire) ont fortement réduit la dissipation numérique induite par le schéma. La formulation classique du WENO5 est clairement en-dessous de la précision d'un schéma Padé du quatrième ordre, tandis que la version corrigée y est quasiment égale. Il faut noter que l'analyse proposée ici pour les schémas WENO ne prend pas en compte l'effet des indicateurs de décentrement. En présence de forts gradients, la procédure de décentrement automatique va fortement réduire l'ordre du schéma pour en améliorer la robustesse. L'utilisation du limiteur présenté précédemment permet d'utiliser le schéma WENO de manière optimale dans certaines régions du calcul (sans fortes discontinuités) et ainsi de s'assurer l'obtention d'une solution la plus précise possible.

3.1.3Discrétisation des termes diffusifs

Le calcul des termes diffusifs est effectué en utilisant un schéma du quatrième ordre proposé par Kudryavtsev et al. [52].

Le terme diffusif des équations de Navier-Stokes est :

- $\partial \sigma_{ij}$ pour les équations de quantité de mouvement; • $\frac{\overline{\partial x_i}}{\partial u_i \sigma_{ij}} - q_j$
- pour l'équation d'énergie totale;

où σ_{ij} et q_i sont respectivement les tenseurs des efforts visqueux et le flux de chaleur définis précédemment.

La première ordre de dérivée est calculée avec un schéma centré du quatrième ordre qui s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} = \frac{\Phi_{i-2} - 8\Phi_{i-1} + 8\Phi_{i+1} - \Phi_{i+2}}{12\Delta x_i} \ . \tag{3.28}$$

Cependant σ_{ij} est exprimé à partir de dérivées. Afin de conserver le quatrième ordre, il est nécessaire de les évaluer sur quatre points également. Or, utiliser le schéma de



(a)



Fig3.3 – Partie Réelle et Imaginaire du nombre d'onde modifié pour différents schémas.

dérivation précédent conduit à utiliser un très large stencil de points (9 points de i-4 à i+4). La gestion des conditions aux limites deviendrait très problématique car le schéma WENO du 5^{ème} ordre ne requiert que 3 points virtuels dans la condition aux limites. La solution apportée consiste à combiner différentes formulations au cinquième ordre de ces dérivées sur le stencil de points déjà utilisé par le WENO5

(de i - 2 à i + 2). Elles s'écrivent ainsi :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\Big|_{i-2} = \frac{-25\Phi_{i-2} + 48\Phi_{i-1} - 36\Phi_i + 16\Phi_{i+1} - 3\Phi_{i+2}}{12\Delta x_i} ,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\Big|_{i-1} = \frac{-3\Phi_{i-2} - 10\Phi_{i-1} + 18\Phi_i - 6\Phi_{i+1} + \Phi_{i+2}}{12\Delta x_i} ,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\Big|_{i+1} = \frac{-\Phi_{i-2} + 6\Phi_{i-1} - 18\Phi_i + 10\Phi_{i+1} + 3\Phi_{i+2}}{12\Delta x_i} ,$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}\Big|_{i+2} = \frac{3\Phi_{i-2} - 16\Phi_{i-1} + 36\Phi_i - 48\Phi_{i+1} + 25\Phi_{i+2}}{12\Delta x_i} .$$

Ainsi, les termes visqueux sont exprimés sur un stencil équivalent à celui des flux convectifs. Cela permet de garder un traitement unifié des conditions aux limites.

3.1.4 Discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle est réalisée de manière explicite. Le principal avantage des schémas explicites réside dans leur capacité à capturer les phénomènes physiques instationnaires. Les phénomènes physiques étudiés nécessitent cependant des pas de temps très petits afin résoudre complètement leur comportement temporel.

Parmi les schémas temporels, la famille des schémas Runge-Kutta offre un très bon compromis entre précision, coût de calcul et stabilité. Les équations à résoudre peuvent être résumées de la manière suivante, en introduisant un opérateur spatial L prenant en compte les effets convectifs et diffusifs des équations de Navier-Stokes présentées précédemment.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} = L(W) , \qquad (3.30)$$

où W est le vecteur des variables conservatives.

Différents ordres de précision existent pour évaluer la dérivée temporelle. De manière générale, une méthode Runge Kutta d'ordre 'n' utilise 'n' étapes pour évaluer la valeur de W^{n+1} à partir de la solution initiale W^n . Pour le troisième ordre, les trois étapes se décomposent de la façon suivante :

$$W^{(1)} = W^n + \Delta t L(W^n)$$
 (3.31)

$$W^{(2)} = \frac{3}{4}W^n + \frac{1}{4}W^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(W^{(1)})$$
(3.32)

$$W^{n+1} = \frac{1}{3}W^n + \frac{2}{3}W^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(W^{(2)})$$
(3.33)

Des variantes, dites à stockage compact, réduisent le coût informatique de la méthode. Lele [57] a proposé une des ces variantes pour la méthode Runge-Kutta d'ordre 3.

Cependant, ce type de schéma explicite est contraint par un critère de stabilité. Ce critère vient de l'étude de la stabilité des équations aux dérivées partielles proposée par Courant *et al.* [22] et s'écrit pour une équation aux dérivées partielles monodimensionnelle hyperbolique :

$$\frac{U\Delta t}{\Delta x} < CFL . \tag{3.34}$$

Pour des raisons de stabilité, le nombre CFL (Courant, Friedrichs, et Lewy) doit être strictement inférieur à 1. Il correspond au temps de discrétisation temporelle maximum admissible pour décrire la propagation d'une onde voyageant à la vitesse U sur un maillage de taille Δx .

Ainsi, le pas de temps utilisé dans le code de calcul est évalué de la manière suivante :

$$\Delta t = CFL \times \min\left(\min_{i=1,3} (\Delta t_{x_i,c}, \Delta t_{x_i,d})\right)$$
(3.35)

où

$$\Delta t_{x_i,c} = \frac{\Delta x_i}{|u_i| + c} \quad \text{et} \qquad \Delta t_{x_i,d} = \frac{\Delta x_i^2 P_r}{2\gamma\mu} . \tag{3.36}$$

 $\Delta t_{x_i,c}$ correspond au pas de temps issu de la partie hyperbolique des équations de Navier-Stokes, tandis que $\Delta t_{x_i,d}$ correspond à la partie visqueuse des équations.

3.1.5 Validations 1D et 2D

L'objectif de ce paragraphe est d'effectuer quelques tests de non-regression afin de valider l'utilisation du schéma numérique WENO5-SOL. Il sera testé sur des castests académiques monodimensionnels et bidimensionnel dans un second temps. Les validations 1D sont basées sur l'évolution temporelle de discontinuités qui peuvent interagir avec de faibles fluctuations de masse volumique dans le problème de Shu-Osher. Une étude 2D de focalisation de choc sur une paroi concave permet aussi de percevoir les apports des modifications apportées au schéma numérique.

Validations 1D : Tube à choc, et assimilés

• Tube à choc de Sod [97] :

Ce premier cas de validation consiste à simuler un écoulement eulérien. Dans un tube supposé infiniment long, un gaz dans deux états thermodynamiques différents est séparé par une membrane. Les conditions initiales de masse volumique, vitesse et pression sont de part et d'autre de la membrane [97] :

$$\begin{cases} \rho_l = 1 & \rho_r = 0,125 \\ u_l = 0 & p_l = 1 & p_r = 0,1 \end{cases}$$



Fig 3.4 – Schéma de l'évolution temporelle d'un tube à choc après la rupture de la membrane.

La dynamique du phénomène présente des zones avec de très forts gradients : une fois la membrane rompue, un choc se propage de la zone de pression élevée vers la zone de pression faible à une vitesse notée u_c comme schématisé sur la Fig. 3.4. Dans le même temps, une onde de détente se propage en sens inverse à une vitesse notée u_d . Ces deux phénomènes sont séparés par une discontinuité de contact, discontinuité de masse volumique à pression constante, se déplaçant à la vitesse u_s . Le CFL est fixé à 0,7 et le maillage compte 200 points. Une



Fig 3.5 – Solution à t = 0,4 du tube à choc de Sod.

solution à un temps précis est tracée sur la Fig. 3.5. Les trois phénomènes physiques décrits précédemment sont bien présents :

- l'onde de détente entre $x \approx 0.3$ et $x \approx 0.5$,
- la discontinuité de contact à $x \approx 0,69$: en examinant la Fig. 3.5(a) et (b), la pression reste bien constante,
- le choc à $x \approx 0.85$, avec une forte variation simultanée de masse volumique

et de pression.

Ce cas-test n'est pas assez sévère pour visualiser une différence majeure entre le WENO5-SOL et le WENO5. Cependant, le résultat montre que le WENO5-SOL ne perd pas la qualité de robustesse du WENO5. Des cas tests plus sévères permettront de démontrer l'amélioration de la précision.

• Convection d'une discontinuité de contact :

Ce cas-test permet de quantifier la capacité du schéma à convecter une discontinuité d'une des variables aérodynamiques. Typiquement, cette problématique se produit lors de la présence de ligne de glissement dans l'écoulement, *i.e.* une variation de masse volumique à pression constante. Le choix de ce type de schéma à capture de choc permet de résoudre de très forts gradients sans introduire d'oscillations néfastes.

Le cas-test s'apparente à un tube à choc (300 mailles). Les différences principales sont la pression et la vitesse uniforme dans le domaine. L'enjeu est d'essayer de définir le rapport de masse volumique que le code pourra supporter sans introduire d'erreur de dispersion. La Fig. 3.6 montre les résultats obtenus pour des rapports de masse volumique jusqu'à 3×10^{14} où des oscillations apparaissent. Cependant un tel rapport de masse volumique ne se rencontre presque jamais dans des situations réelles classiques où il est au maximum de 1000 dans le cas d'écoulements diphasiques avec de l'air et de l'eau.

On remarque ici l'épaississement de la discontinuité dû à l'ajout de viscosité par le schéma. Sept mailles sont nécessaires pour décrire la discontinuité pour un ratio de 10 tandis que trente cinq mailles sont nécessaires pour le plus grand rapport présenté. Dans les applications mettant en jeu des fluides dans un état supercritique, les variations de masse volumique peuvent atteindre des très hautes valeurs pour de très faibles variations de température. Par exemple, au alentour du point critique, une variation de 0,1 K à pression constante donne une variation de 368 kg.m⁻³ pour de l'oxygène et de 28,48 kg.m⁻³ pour de l'hydrogène.

• Problème de Shu-Osher [91] :

Le problème de Shu-Osher [91] concerne la propagation d'une onde de choc dans un milieu avec des petites fluctuations de masse volumique. Ces perturbations peuvent être très rapidement dissipées, si la viscosité intrinsèque des schémas numériques est importante.

Les conditions initiales sont :

$$\begin{cases} \rho_l = 3.86 \\ u_l = 2.63 \\ p_l = 10.33 \end{cases} \qquad \begin{cases} \rho_r = 1 + 0.2\sin(5x) \\ u_r = 0 \\ p_r = 1 \end{cases}$$

La solution de référence a été obtenue avec un maillage très raffiné, contenant 2000 points. A ce stade, il faut noter que tous les schémas WENO (WENO5, WENO5-SO et WENO5-SOL) convergent vers la même solution, ce qui prouve qu'ils sont tous consistants.

Afin de mieux les comparer, un maillage lâche de 300 points est utilisé pour résoudre l'écoulement. Les résultats sont présentés sur la Fig. 3.7. Tous les



Fig 3.6 – Convection d'une discontinuité de contact avec différents ratios de masse volumique.

schémas testés prédisent avec précision la position des pics de fluctuations de pression. Cependant, leurs amplitudes ne sont correctement captées qu'avec le WENO5-SOL. Il a été testé sans son limiteur afin de bien voir son influence sur ce cas-test relativement sévère. L'écart avec le WENO5 est alors très limité. ce qui prouve que l'apport du sub-stencil supplémentaire et des coefficients linéaires optimisés est relativement faible. Les gains apportés sont quasiment totalement gommés par les opérateurs de décentrement qui rajoutent de la dissipation dans les zones où de forts gradients sont présents. L'apport du limiteur permet d'annuler complètement le faible décentrement induit dans les zones de faibles gradients et ainsi obtenir une solution très précise grâce aux coefficients linéaires optimisés et au sub-stencil supplémentaire. Les résultats obtenus avec le WENO5-SOL, proposé par Taylor et al. [105], sont les meilleurs de ceux obtenus avec les schémas de référence et sont en accord avec la solution de référence. On peut donc penser que ce schéma sera un bon candidat pour traiter des problèmes plus complexes, incluant des ondes de choc, de la turbulence ou encore des transferts thermiques.

Validations 2D : Focalisation de choc

Le phénomène de focalisation de choc apparaît lorsqu'une onde plane interagit fortement avec une paroi concave, laissant apparaître des phénomènes de réflexion de Mach et d'instabilités transitionnelles de couche de mélange pariétale. Ce problème délicat a été récemment étudié expérimentalement par Skews & Kleine [93]. Les auteurs ont développé une base de données expérimentales, basée sur des visualisations strioscopiques.

Le phénomène de focalisation se déroule en deux étapes; la première correspond à la propagation du choc dans la cavité cylindrique. Différents phénomènes de réflexions de choc apparaissent alors, comme par exemple la réflexion de Mach inverse ou encore la réflexion régulière transitionnelle. La deuxième étape de l'évolution de







Fig 3.7 – A t=1.4 : (a) Profil de masse volumique du problème de Shu-Osher ; (b) Agrandissement du profil de masse volumique du problème de Shu-Osher au voisinage des fluctuations post-choc.

ce phénomène correspond à l'impact du choc et à sa réflexion sur la paroi avec la formation d'une couche de mélange compressible, siège d'instabilités tourbillonnaires de type Kelvin-Helmholtz (KH).

L'intérêt de la simulation de ces phénomènes réside, d'une part, dans leurs complexités physiques et, d'autre part, dans la nécessité d'utiliser des approches numériques à la fois robustes et précises pour bien les appréhender. Dans les cas-tests précédents, ces aspects étaient considérés séparément. Ici, ils sont tous regroupés dans une seule simulation. La première phase met en jeu surtout des interactions entre différents chocs, tandis que la seconde partie met en jeu des interactions entre chocs et structures tourbillonnaires puis dans un second temps l'évolution temporelle de ces structures tourbillonnaires. Ces deux aspects sont donc appréhendés dans cette simulation.

La première partie du phénomène met en perspective la robustesse des schémas WENO mais très peu sa précision. Ainsi, les différences obtenues sont mineures. Les interactions entre le choc incident et le mur conduisent à une transition de la topologie proche paroi du choc. Elle passe d'une réflexion de Mach inverse (Fig. 3.8(a)) vers une TRR (Transitional Regular Reflection) (Fig. 3.8(c)). Le point de transition (Fig. 3.8(b)) est prédit avec une précision équivalente par tous les schémas testés. La position obtenue est paramétrable en fonction uniquement de l'angle par rapport à la verticale du centre de la cavité. Ben-Dor [6] a proposé un modèle permettant d'évaluer analytiquement cet angle à partir du nombre de Mach du choc incident et des propriétés du fluide (ici $\gamma = 1,36$). Pour le nombre de Mach étudié (M = 1,38), l'angle prévu est 59,24°, et l'angle obtenu numériquement est 60,37°. Ce point de passage est important pour la suite du phénomène car les lignes de glissements (**S** et **S**') qui interagissent ensuite sont disposées dans le domaine grâce à cette transition. La Fig. 3.9 montre une comparaison entre les schémas WENO3, WENO5, WENO5-



Fig 3.8 – Transition du pied du choc. (a) reflexion de Mach inverse, (b) point de transition, (c) Reflexion Régulière Transitionnée. Légende : \mathbf{I} : choc incident, \mathbf{S} : ligne de glissement, \mathbf{T} : point triple, \mathbf{H} : Mach stem, \mathbf{R} : choc réfléchi, \mathbf{W} : choc proche paroi

SOL. A l'évidence, ce dernier fournit des résultats plus précis, notamment au niveau des instabilités des couches de mélange. Le jet et les tourbillons proches des parois sont également mieux détaillés avec ce schéma. D'autre part, la comparaison avec les résultats expérimentaux de Skews et Kleine [93] est très encourageante. La différence majeure concerne le décollement des tourbillons proches des parois, phénomène piloté exclusivement par la viscosité du fluide. En absence des forces visqueuses, le décollement n'est pas pris en compte par les différentes versions du schéma WENO. En revanche, grâce à la dissipation numérique intrinsèque des schémas décentrés un décollement a pu être observé en utilisant le WENO3. Ce phénomène reste non physique, car piloté par la viscosité numérique, et sa modélisation correcte nécessite une prise en compte de la couche limite, via une simulation complète des équations de Navier-Stokes. Cette simulation complète a été réalisée afin de pouvoir comparer qualitativement les résultats obtenus. La Fig. 3.9(d) montre un très bon accord entre le résultat numérique et l'expérience. Les positions du jet central, des instabilités de Kelvin Helmholtz, et des tourbillons proches paroi sont très biens retranscrits par la simulation. Le décollement du tourbillon proche de la paroi est aussi capté et confirme son origine visqueuse. Cette étude a fait l'objet d'une présentation orale lors de la conférence ISIS18, organisé par l'INSA de Rouen en juillet 2008. Elle fut suivie d'une publication dans AIAA Journal (voir annexe B) où ce phénomène de focalisation de choc est étudié dans le cas d'obstacles cylindriques et paraboliques [103].

3.2 Code PPMBFS

Le code PPMBFS¹ est un code de calcul permettant de simuler des écoulements instationnaires tridimensionnels. Il a déjà été validé sur de nombreuses simulations [66, 121, 126, 127, 128]. Il utilise des coordonnées généralisées et une formulation volume fini afin de pouvoir simuler des géométries complexes. Cependant, afin de ne pas complexifier les notations, la description des schémas se fera sans évoquer les métriques. Le parallélisme du code est assuré grâce à l'interface MPI. Sa formulation reste complètement compressible et il prend en compte les effets de gaz réels avec l'équation d'état SRK [96] (Eq. (2.9)). La plupart des écoulements avec un fluide cryogénique sont très souvent à des nombres de Mach très faibles. Une formulation compressible explicite serait alors très pénalisante à cause d'un pas de temps extrêmement petit. Pour contourner cette difficulté, un algorithme de préconditionnement est ajouté au système d'équations afin d'améliorer la convergence. Celle-ci s'écrit dorénavant ainsi :

$$\Gamma \frac{\partial Z}{\partial \tau} + \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial FQ_{cx}}{\partial x} + \frac{\partial FQ_{cy}}{\partial y} + \frac{\partial FQ_{cz}}{\partial z} = \frac{\partial FQ_{vx}}{\partial x} + \frac{\partial FQ_{vy}}{\partial y} + \frac{\partial FQ_{vz}}{\partial z} \quad (3.37)$$

^{1.} PPMBFS : Preconditioned Parallel Multi Block finite volume Flow Solver



Fig 3.9 – Strioscopie numérique des instabilités post-focalisation avec différents schémas numériques : (a) WENO3, (b) WENO5, (c) WENO5-SOL ; (d)
Comparaison entre le résultat de la simulation avec les effets visqueux (partie inférieure) et un shadowgraph de l'expérience (partie supérieure). Image de l'expérience extraite de l'article de Skews & Kleine [93].

où les différents vecteurs s'expriment par :

$$Z = \left(\overline{P}_{g}, \widetilde{u}, \widetilde{v}, \widetilde{w}, \widetilde{T}\right)^{t}$$

$$Q = \left(\overline{\rho}, \overline{\rho}\widetilde{u}, \overline{\rho}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{E}_{t}\right)^{t}$$

$$FQ_{cx} = \left(\overline{\rho}\widetilde{u}, \overline{\rho}\widetilde{u^{2}} + \overline{P}, \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w}, \overline{\rho}\left(\widetilde{E_{t}u} + \widetilde{P}u\right)\right)^{t}$$

$$FQ_{cy} = \left(\overline{\rho}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{v}, \overline{\rho}\widetilde{v^{2}} + \overline{P}, \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w}, \overline{\rho}\left(\widetilde{E_{t}v} + \widetilde{P}v\right)\right)^{t}$$

$$FQ_{cz} = \left(\overline{\rho}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{u}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{v}\widetilde{w}, \overline{\rho}\widetilde{w^{2}} + \overline{P}, \overline{\rho}\left(\widetilde{E_{t}w} + \widetilde{P}w\right)\right)^{t}$$

$$FQ_{vx} = (0,\overline{\sigma}_{xx},\overline{\sigma}_{xy},\overline{\sigma}_{xz},\overline{u\sigma}_{xx}+v\sigma_{xy}+w\sigma_{xz}+q_x)^{t}$$

$$FQ_{vy} = (0,\overline{\sigma}_{yx},\overline{\sigma}_{yy},\overline{\sigma}_{yz},\overline{u\sigma}_{yx}+v\sigma_{yy}+w\sigma_{yz}+q_y)^{t}$$

$$FQ_{vz} = (0,\overline{\sigma}_{zx},\overline{\sigma}_{zy},\overline{\sigma}_{zz},\overline{u\sigma}_{zx}+v\sigma_{zy}+w\sigma_{zz}+q_z)^{t}$$

Comme pour le code CHOC-WAVES, les termes inaccessibles sont décomposés en une partie résolue et une partie modélisée. L'introduction d'une pression relative, $\overline{P}_g = \overline{P} - P_0$, dans le vecteur de préconditionnement permet d'éviter la dégénérescence des valeurs propres du système dans les applications bas-Mach [20, 92].

L'ajout du terme $\Gamma \partial Z / \partial \tau$ et de la double itération en temps (sous-pas de temps de convergence dans le pas de temps physique) permet d'éviter les problèmes de valeurs propres où Γ est la matrice de préconditionnement et τ le pseudo pas de temps. Ils seront définis et explicités dans le paragraphe suivant.

Juste avant d'aborder les discrétisations spatiales, il est utile d'apporter quelques éclaircissements sur l'approche volume fini. Cette méthode consiste dans l'intégration de l'Eq. (3.37) sur un volume de contrôle, V, délimité par la surface δV . Elle devient donc, après utilisation du théorème de Gauss :

$$\int \int \int_{V} \left(\Gamma \frac{\partial Z}{\partial \tau} + \frac{\partial Q}{\partial t} \right) dV + \int \int_{\delta V} \vec{W} \cdot \vec{n} dS = 0$$
(3.38)

où $\vec{W} = (FQ_{cx} - FQ_{vx})\vec{i} + (FQ_{cy} - FQ_{vy})\vec{j} + (FQ_{cz} - FQ_{vz})\vec{k}$. A partir de ce point, il reste à exprimer les flux convectifs et diffusifs aux interfaces des volumes de contrôle grâce aux schémas numériques présentés dans la suite. Les termes diffusifs sont discrétisés à l'aide d'un schéma centré d'ordre 4 extrêmement classique [125]. Il ne sera pas explicité de par sa simplicité en comparaison des algorithmes plus complexes tels que le préconditionnement.

Les installations mettant en jeu des fluides supercritiques sont très souvent dans des conditions dynamiques dites bas-Mach. La résolution de ce type d'écoulement avec une formulation compressible, comme celle du code CHOC-WAVES, est très handicapée à cause d'un pas de temps très faible. Pour effacer cette difficulté, un préconditionnement est ajouté au système d'équation. Il permet d'avoir une convergence sur des pas de temps plus grands. Avec les développements des relations thermodynamiques effectués précédemment, les matrices de passage suivantes $T = \partial Q/\partial Z$, $A = \partial F Q_{cx}/\partial Z$, $B = \partial F Q_{cy}/\partial Z$ et $C = \partial F Q_{cz}/\partial Z$ sont utilisées pour passer de l'espace des variables conservatives à l'espace des variables de préconditionnement; celles-ci sont explicitées dans l'article de Meng *et al.* [66]. Seule la construction de la matrice T sera décrite ici car elle est le point de départ de la procédure de préconditionnement. De manière générale, ces matrices font intervenir des dérivées partielles entrant dans les algorithmes de résolutions des équations. Elles sont décrites dans le paragraphe suivant.

3.2.1 Propriétés thermodynamiques

Afin de résoudre les équations de Navier-Stokes, certaines propriétés du fluide sont nécessaires. En effet, les dérivées partielles de grandeurs thermodynamiques telles que la pression, l'énergie interne, l'enthalpie, et la vitesse du son sont indispensables au bon déroulement de l'algorithme de résolution. Pour cela, l'écriture de la différentielle exacte de chacune de ces variables permettra de les exprimer aisément. Les équations qui vont suivre sont indépendantes de l'équation d'état choisie. Dans le cas d'un gaz parfait, elles sont très simples à évaluer mais deviennent plus complexes avec les lois d'état pour les gaz réels. D'après les lois de la thermodynamique pour les gaz mono-espèces, toute variable intensive s'exprime à partir deux autres variables intensives. Ainsi, la pression est une fonction de la température et de la densité.

$$P = fct(T,\rho) \tag{3.39}$$

La différentielle exacte s'exprime alors :

$$dP = A_T dT + A_\rho d\rho \tag{3.40}$$

avec

$$A_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho} \text{ et } A_{\rho} = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T .$$
(3.41)

La même approche peut être appliquée à l'énergie interne ($\rho e_i = fct(T,\rho)$).

$$d(\rho e_i) = \rho \left(\frac{\partial e_i}{\partial T}\right)_{\rho} dT + \left(\frac{\partial \rho e_i}{\partial \rho}\right)_T d\rho$$
(3.42)

$$= \rho C_v dT + \left(\frac{\partial \rho e_i}{\partial \rho}\right)_T d\rho \tag{3.43}$$

$$= \rho de_i + e_i d\rho \tag{3.44}$$

L'expression de de_i suivante peut être déduite :

$$de_i = C_v dT - \frac{e_i}{\rho} d\rho \tag{3.45}$$

 $d\rho$ peut être remplacé en utilisant l'Eq. (3.40) et :

$$de_i = \left(C_v + \frac{e_i}{\rho} \frac{A_T}{A_\rho}\right) dT - \frac{e_i}{\rho A_\rho} dP$$
(3.46)

L'enthalpie, $h = e_i + P/\rho$ est une autre grandeur thermodynamique importante pour la résolution des équations de Navier-Stokes.

$$dh = de_i + \frac{dP}{\rho} - \frac{P}{\rho^2} d\rho \tag{3.47}$$

Les Eqs. (3.40) et (3.46) sont réinjectées dans l'Eq. (3.47):

$$dh = \left[C_v + \left(e_i + \frac{P}{\rho}\right)\frac{A_T}{\rho A_\rho}\right]dT + \left[\frac{1}{\rho} - \left(e_i + \frac{P}{\rho}\right)\frac{1}{\rho A_\rho}\right]dP \qquad (3.48)$$

L'expression de la capacité calorifique à pression constante apparaît ici directement.

$$C_p = C_v + \left(e_i + \frac{P}{\rho}\right) \frac{A_T}{\rho A_\rho}$$
(3.49)

La dernière variable nécessaire est la vitesse du son, c. Il s'agit de la dérivée partielle de P par rapport à ρ à entropie, s, constante.

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s \tag{3.50}$$

$$= \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho} \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_{s} + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{T}$$
(3.51)

De la même manière que l'énergie interne et l'enthalpie, l'entropie peut s'exprimer à partir de deux autres variables intensives : $s = fct(T,\rho)$, et sa différentielle exacte s'écrit :

$$ds = \frac{C_v}{T} dT - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho} d\rho \qquad (3.52)$$

A l'aide de l'Eq. (3.52), il est possible d'exprimer $(\partial T/\partial \rho)_s$:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_{s} = \frac{(\partial s/\partial \rho)_{T}}{(\partial s/\partial T)_{\rho}}$$
(3.53)

$$= \frac{T}{C_v \rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{\rho} = \frac{T A_T}{C_v \rho^2} , \qquad (3.54)$$

d'où on en déduit pour c l'expression suivante :

$$c^2 = \frac{C_p}{C_v} A_\rho \ . \tag{3.55}$$

3.2.2 Discrétisation temporelle et préconditionnement

Tous les termes de la première colonne de la matrice T ont en commun :

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)_T = \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial P}{\partial\rho}\right)_s = \frac{\gamma}{c^2}$$

La matrice de préconditionnement Γ s'obtient en remplaçant la vitesse du son par le facteur de préconditionnement β qui s'exprime ainsi :

$$\beta = \gamma \epsilon c^2 / (1 + (\gamma - 1)\epsilon) \tag{3.56}$$

et la matrice de préconditionnement s'écrit :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \frac{\gamma}{\beta} & 0 & 0 & 0 & -\frac{A_T}{A_\rho} \\ \frac{\gamma u}{\beta} & \rho & 0 & 0 & -\frac{A_T u}{A_\rho} \\ \frac{\gamma v}{\beta} & 0 & \rho & 0 & -\frac{A_T v}{A_\rho} \\ \frac{\gamma w}{\beta} & 0 & 0 & \rho & -\frac{A_T w}{A_\rho} \\ \frac{\gamma h_t}{\beta} & \rho u & \rho v & \rho w & \rho \frac{\partial E_t}{\partial T} \Big|_P - \frac{A_T E_t}{A_\rho} \end{pmatrix}$$
(3.57)

La variable ϵ est le facteur de préconditionnement qui est proportionnel au carré du nombre de Mach local et ainsi contrôle les échelles temporelles convectives et visqueuses. Notons que lorsque $\epsilon \to 1$ alors $\Gamma = T$. L'utilisation du préconditionnement change aussi les valeurs propres lors du passage aux variables caractéristiques. Comme précédemment elles sont obtenues en diagonalisant les matrices $\Gamma^{-1}A$, $\Gamma^{-1}B$, $\Gamma^{-1}C$ et sont : λ_1 , λ_2 , u, u, u avec :

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left[U(1+\epsilon) + \sqrt{U^2(1-\epsilon)^2 + 4\epsilon c^2} \right] , \qquad (3.58)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} \left[U(1+\epsilon) - \sqrt{U^2(1-\epsilon)^2 + 4\epsilon c^2} \right] .$$
 (3.59)

U représente la vitesse suivant la direction du calcul du flux convectif. Notons encore une fois que lorsque ϵ tend vers 1, les valeurs propres classiquement obtenues sont retrouvées. Le facteur de préconditionnement est évalué selon les méthodes proposées par Choi et Merkel [20], Venkateswaran et Merkel [113] ou Buelow *et al.* [13].

$$\epsilon = \min\left(1, \max\left(\epsilon_c, \epsilon_{\Delta t}, \epsilon_v\right)\right) \tag{3.60}$$

Facteur de préconditionnement convectif : ϵ_c

Choi et Merkel [20] ont montré qu'un critère efficace pour le préconditionnement convectif, qui assure que les ondes acoustiques et les vitesses du fluide sont du même ordre de grandeur, est obtenu quand ϵ est relié proportionnellement au nombre de Mach local. Afin de s'assurer de sa bonne formulation, il est nécessaire d'examiner le nombre de condition des caractéristiques, CC, ratio entre la plus grande et la plus faible valeur propre. L'optimum est obtenu quand ce rapport est égal à l'unité. La Fig. 3.10 représente son contour en fonction des expressions des valeurs propres (Eqs. (3.58) et (3.59)). Lorsque le nombre de Mach tend vers 0, alors CC tend



Fig 3.10 – Contour du nombre de condition des caractéristiques en fonction du carré du Mach local et du facteur de préconditionnement. (Extrait de [125])

vers 2, et le minimum de la fonction est obtenu pour $\epsilon = 2M^2$. Pour s'assurer d'un comportement aux faibles nombres de Mach, le facteur de préconditionnement convectif est alors choisi ainsi :

$$\epsilon_c = \begin{cases} \epsilon^2 & \text{si} \quad M \leq \epsilon \\ 2M^2 & \text{si} \quad \epsilon < M < 1 \\ 1 & \text{si} \quad M > 1 \end{cases}$$

Enfin, pour éviter des singularités dans les zones de très faibles vitesses (quasistagnantes), une petite valeur de l'ordre de 10^{-5} est alors utilisée.

Facteur de préconditionnement temporel : $\epsilon_{\Delta t}$

Venkateswaran et Merkel [113] ont utilisé les études de stabilité menées par von Neumann pour déduire la bonne formulation du facteur de préconditionnement temporel. Ils indiquent que le choix optimal est compris entre le facteur de préconditionnement convectif, et l'unité. Après quelques simplifications et hypothèses, il s'écrit :

$$\epsilon_{\Delta t} = \frac{1}{c^2} \left[\left(\frac{l_x}{\pi \Delta t} \right)^2 + \left(\frac{l_y}{\pi \Delta t} \right)^2 + \left(\frac{l_z}{\pi \Delta t} \right)^2 \right] + M^2 \tag{3.62}$$

Facteur de préconditionnement diffusif : ϵ_v

Dans les zones où les phénomènes diffusifs prennent le pas sur les phénomènes instationnaires et convectifs, les facteurs de préconditionnement respectifs doivent être modifiés pour prendre en compte le changement du système des équations différentielles hyperboliques vers un système de type parabolique. Buelow *et al.* [13] ont mené une série d'études afin de déduire le facteur de préconditionnement visqueux optimal pour les équations de Navier-Stokes. Il découle de leurs études que trois prérequis, basés sur le nombre de Reynolds de la cellule (Re_{cell}) et le nombre de Mach local, sont nécessaires pour pouvoir énoncer un critère général.

- pour les hauts nombres de $Re_{cell} >> 1$: la vitesse des ondes acoustiques doit être mise au même ordre de grandeur que la vitesse du fluide. Ceci est déjà réalisé par le facteur de préconditionnement convectif,
- les faibles nombre de Reynolds $Re_{cell} \ll 1$ et les haut nombres de Reynolds acoustiques $Re_{cell}/M \gg 1$: les phénomènes diffusifs doivent être du même ordre que les vitesses du fluide, tout comme les ondes acoustiques,
- les faibles nombre de Reynolds $Re_{cell} \ll 1$ et les haut nombres de Reynolds acoustiques $Re_{cell}/M \ll 1$: les phénomènes diffusifs doivent être du même ordre que les vitesses du fluide.

Afin de satisfaire à ces trois conditions simultanément, le facteur de préconditionnement visqueux doit être fonction du nombre de Fourier (VNN). Buelow *et al.* [12, 13] ont proposé la formulation suivante :

$$\epsilon_v = \max\left(\frac{\widetilde{u}^2\zeta_x(\zeta_x-1)}{\widetilde{u}^2\zeta_x^2+c^2}, \frac{\widetilde{v}^2\zeta_y(\zeta_y-1)}{\widetilde{v}^2\zeta_x^2+c^2}, \frac{\widetilde{w}^2\zeta_z(\zeta_z-1)}{\widetilde{w}^2\zeta_x^2+c^2}\right)$$
(3.63)

avec

$$\begin{aligned} \zeta_x &= \max\left(\nu, \frac{\nu}{Pr}\right) \frac{1}{\widetilde{u}} \frac{CFL}{VNN} ,\\ \zeta_y &= \max\left(\nu, \frac{\nu}{Pr}\right) \frac{1}{\widetilde{v}} \frac{CFL}{VNN} ,\\ \zeta_z &= \max\left(\nu, \frac{\nu}{Pr}\right) \frac{1}{\widetilde{w}} \frac{CFL}{VNN} .\end{aligned}$$

3.2.3 Discrétisation des termes convectifs

Le schéma utilisé pour discrétiser les flux convectifs est un schéma centré du quatrième ordre avec une formulation TVD (Total Variation Diminishing) et fut présenté par Rai et Chakravarthy [81]. Le flux convectif au quatrième ordre à l'interface i + 1/2 se calcule ainsi :

$$W_{i+1/2} = \Psi_{i+1/2} - \phi_4 \frac{\Psi_{i+3/2} - 2\Psi_{i+1/2} + \Psi_{i-1/2}}{24}$$
(3.64)

où ϕ_4 est une variable qui permet de basculer d'une formulation quatrième ordre $(\phi_4 = 1)$ à une formulation du deuxième ordre $(\phi_4 = 0)$, et $\Psi_{i+1/2}$ s'écrit :

$$\Psi_{i+1/2} = \frac{F_{i+1/2}^L + F_{i+1/2}^R}{2} \quad . \tag{3.65}$$

Les exposants L et R représentent les cellules à gauche et à droite de l'interface. Pour conserver l'ordre de l'Eq. (3.64), il est nécessaire que les termes F^L et F^R soient évalués avec un ordre supérieur ou égal à quatre. Ils sont exprimés de la manière suivante afin de pouvoir aisément changer l'ordre global du schéma et selon une formulation TVD.

$$\begin{split} F_{i+1/2}^{L} &= \alpha_{i} + \phi_{2} \left(\frac{3\nabla\alpha_{i+1} + \nabla\alpha_{i}}{8} \right) \\ &+ \phi_{4} \left(\frac{-5\nabla\alpha_{i+2} + 7\nabla\alpha_{i+1} + \nabla\alpha_{i} - 3\nabla\alpha_{i-1}}{128} \right) \\ F_{i+1/2}^{R} &= \alpha_{i} - \phi_{2} \left(\frac{\nabla\alpha_{i+2} + 3\nabla\alpha_{i+1}}{8} \right) \\ &+ \phi_{4} \left(\frac{3\nabla\alpha_{i+3} - \nabla\alpha_{i+2} - 7\nabla\alpha_{i-1} + 5\nabla\alpha_{i}}{128} \right) \end{split}$$

où $\nabla \alpha_i = \alpha_i - \alpha_{i-1}$. ϕ_4 et ϕ_2 permettent choisir l'ordre du schéma numérique du cinquième ordre ($\phi_4 = \phi_2 = 1$), au troisième ordre ($\phi_4 = 0, \phi_2 = 1$) et second ordre ($\phi_4 = \phi_2 = 0$).

Canal supersonique à parois isothermes

Sommaire

4.1 Sim	ulation Numérique Directe
4.1.1	Paramètres principaux de la simulation
4.1.2	Génération des conditions initiales 61
4.1.3	Formulation du terme de forçage
4.1.4	Domaine de calcul
4.1.5	Ecoulement moyen et effets de compressibilité
4.1.6	Analyse du champ instantané
4.1.7	Frottement pariétal en fonction du nombre de Reynolds 74
4.2 Sim	ulation aux Grandes Echelles
4.2.1	Mise en place des simulations
4.2.2	Comparaison des modèles de sous-maille 80
4.3 Con	clusion

La problématique des canaux de refroidissement des moteurs-fusées consiste dans l'évaluation des échanges thermiques. Ces transferts sont reliés aux structures turbulentes proches parois et l'étude des corrélations thermodynamiques permet alors de mieux comprendre les phénomènes physiques. Dans ce chapitre, un canal turbulent compressible avec des effets thermiques pariétaux [29] est simulé par DNS et LES afin de mieux appréhender ces phénomènes.

4.1 Simulation Numérique Directe

4.1.1 Paramètres principaux de la simulation

La configuration du canal est présentée sur la Fig. 4.1 où les directions longitudinale et transverse sont périodiques. Malgré l'apparente simplicité du domaine de calcul, il est nécessaire de vérifier le dimensionnement des directions transverse et longitudinale. Ce point est très critique car la turbulence nécessite un espace minimal pour se développer sans contrainte [45].

Les principales caractéristiques du maillage sont résumées dans les tableaux 4.1. La grille de calcul et la distribution de points sont prises identiques à celles de Foysi *et al.* [29]. Le domaine physique $[L_x \times L_y \times L_z]$ est $[4\pi H \times 2H \times 4\pi H/3]$. Pour

$Nx \times Ny \times Nz$	Δx^+	Δy_{min}^+	Δz^+
$192\times151\times128$	14.46	0.84	7.23

Tableau 4.1 – Caractéristiques du maillage.

caractériser l'écoulement dans un canal turbulent, deux nombres de Reynolds sont



Fig 4.1 – Schéma du canal simulé.

utilisés : le premier est le nombre de Reynolds basé sur la vitesse de frottement U_{τ} et la demi hauteur du canal H :

$$Re_{\tau} = \rho_w U_{\tau} H/\mu_w$$
 avec $U_{\tau} = \sqrt{\tau_p/\rho_w}$ et $\tau_p = \mu_w \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_w$

 Re_{τ} est utilisé pour définir des unités sans dimension dites de proches parois, notées avec l'exposant ⁺. Ainsi la distance à la paroi est défini par :

$$y^+ = \frac{yRe_\tau}{H} \quad . \tag{4.1}$$

Avant de vérifier le dimensionnement *a posteriori* avec les courbes d'autocorrélations, il est possible de vérifier qualitativement et *a priori* le dimensionnement spatial du canal en suivant les recommandations de Jimenez et Moin [45]. Ils préconisent de disposer d'un canal ayant au minimum les dimensions $L_x^+ = 300$ et $L_z^+ = 100$ pour que la turbulence de l'écoulement puisse se développer naturellement. Ici, les dimensions du canal sont $L_x^+ = 2652$ et $L_z^+ = 884$ ce qui les satisfait très largement.

Le second est le nombre de Reynolds nominal calculé à partir de la vitesse débitante, U_b , et de la masse volumique moyenne, ρ_m :

$$Re =
ho_m U_b H/\mu_w$$
 avec $U_b = \frac{1}{
ho_m H} \int_0^H
ho U dy$ et $ho_m = \frac{1}{H} \int_0^H
ho \ dy$.

Le nombre de Mach est calculé à partir de la vitesse du son à la paroi $(c_w = \sqrt{\gamma r T_w})$ et de la vitesse débitante : $M = U_b/c_w$.

Re	Re_{τ}	M	$T_w(K)$	H(m)	$Q_w \; (\mathrm{kW.m^{-2}})$
3000	221	1.5	500	0.00684355	26

Tableau 4.2 – Paramètres physiques de la simulation.

Usuellement, une résolution DNS nécessite d'avoir au moins trois points dans la sous-couche visqueuse. Toutefois, une étude plus approfondie des échelles de la turbulence est plus appropriée pour évaluer la taille des premières mailles à proximité de la paroi. Trois échelles caractéristiques précédemment introduites, caractérisent chacune un phénomène précis de l'écoulement. La première est l'échelle intégrale (Λ) qui est liée aux plus grandes structures de l'écoulement et représente la distance au delà de laquelle les corrélations des fluctuations de vitesses deviennent négligeables. L'échelle de Taylor (λ_t) représente l'échelle des structures qui sont en équilibre entre la production de turbulence et la dissipation. L'échelle de Kolmogorov (η_k) représente la plus petite tailles de structures turbulentes qui sont purement dissipatives. Ces trois échelles s'expriment respectivement en fonction de k, l'énergie cinétique turbulente, et ϵ , la dissipation :

$$\Lambda = \frac{k^{3/2}}{\epsilon}$$
$$\lambda_t = \sqrt{\frac{15\mu k}{\rho \epsilon}}$$
$$\eta_k = \left(\frac{\mu^3}{\rho^3 \epsilon}\right)^{1/4}$$

k et ϵ peuvent être évaluées $a\ priori$ à l'aide de relations issues des données du problème.

$$k = \frac{1}{2} (\tau U_b)^2$$

$$\epsilon = C_\epsilon \frac{k^{3/2}}{L}$$

avec le taux de turbulence $\tau = 0,1$, et la constante $C_{\epsilon} = 1,52$ (cf. Section 23.3 dans Monin et Yaglom [71]) et la longueur caractéristique L = H/2. Avec ces approximations, on peut remarquer que seules les échelles de Taylor et de Kolmogorov dépendent de grandeurs qui peuvent varier dans le domaine. Dans le cas d'un écoulement confiné par des parois, les échelles les plus petites se situent au niveau des parois. Il est donc judicieux d'utiliser les valeurs pariétales. En prenant les valeurs à la paroi de masse volumique et de la viscosité dynamique, on obtient les échelles suivantes :

$$\Lambda = 4,5 \text{ mm}$$
$$\lambda_t = 1,2 \text{ mm}$$
$$\eta_k = 0,087 \text{ mm}$$

Les dimensions des premières mailles sont résumées dans le tableau suivant :

Les préconisations pour la construction du maillage DNS sont :

– au moins 3 points dans la sous-couche visqueuse, ie $y^+ \leq 10$,

$$-$$
 et $\Delta y_1^+ \leq 1$.

Ces deux conditions sont totalement respectées. On peut remarquer que l'échelle de Kolmogorov évaluée à la paroi correspond à environ 3 unités de paroi et est définie par trois points.

4.1.2 Génération des conditions initiales

La première technique pour simuler ce type d'écoulement serait d'imposer comme condition initiale les profils moyens de vitesses, de masse volumique et de pression en espérant que l'écoulement se déstabiliserait seul et ainsi la turbulence naitrait et se développerait quasiment naturellement. Cependant, cette méthode est extrêmement coûteuse en temps de calcul car l'écoulement a souvent tendance à se relaminariser avant de transiter vers la turbulence. Afin d'obtenir des résultats rapidement, il est souhaitable de superposer un champ perturbateur au champ moyen. La méthode la plus triviale pour générer des perturbations est d'utiliser un générateur de bruit blanc. Cette approche très simpliste se révèle encore très couteuse en temps de calcul car les fluctuations de vitesse sont très vite amorties ce qui conduit aussi à une relaminarisation de l'écoulement. Par conséquent, elle est inappropriée pour produire une turbulence correctement corrélée.

La méthode proposée par Klein *et al.* [50] est, quant à elle, basée sur l'utilisation de filtres digitaux pour la génération de données fluctuantes en temps réel. Elle permet d'obtenir rapidement un spectre énergétique cohérent. Cette procédure a été légèrement modifiée pour pouvoir l'adapter au cas d'un canal périodique (Annexe C).

Au préalable, il convient de vérifier la procédure d'initialisation en calculant les valeurs moyennes et les fluctuations de l'écoulement de la solution initiale. Les Figs. 4.2, 4.3, et 4.4 montrent que la condition initiale possède les bonnes valeurs moyennes et également les bonnes tendances pour les fluctuations, aussi bien pour les allures que pour les amplitudes.



Fig 4.2 – Profil initial de vitesse longitudinale.

Cette méthode peut devenir relativement coûteuse en temps de calcul comme l'a soulevé Veloudis *et al.* [111] avec l'utilisation d'échelles de turbulence variable spatialement. C'est pour cela que de récents travaux ont été menés pour proposer des solutions à cette difficulté telles que celle de Veloudis *et al.* [112]. Elle permet de réduire jusqu'à 72% le coût de condition turbulente multi-échelles.

4.1.3 Formulation du terme de forçage

L'hypothèse de périodicité de l'écoulement dans la direction longitudinale implique une perte d'information sur le gradient de pression moyenne. Pour compenser cette perte, une force volumique, f_i , est introduite dans l'équation de quantité de mouvement longitudinale et son travail dans l'équation de l'énergie totale, $f_i u_i$. La formulation de ce terme de forçage a été proposée par Morinishi *et al.* [72] et écrite de la façon suivante :

$$f_i = -\tau_{aw} \delta_{i1} / (H\rho_m) \tag{4.2}$$



Fig 4.3 – Profils initiaux de fluctuations moyennes.



Fig 4.4 – Profils initiaux de fluctuations moyennes.

où δ_{ij} est le symbole de Krönecker et

$$\tau_{aw} = (\langle \sigma_{12} \rangle_{x-z|y=H} - \langle \sigma_{12} \rangle_{x-z|y=-H})/2 \tag{4.3}$$
Les variables entre $\langle \rangle_{x-z|y=\pm H}$ sont moyennées suivant les directions homogènes (x et z) et exprimées aux parois supérieure et inférieure, respectivement. Le terme ainsi proposé réinjecte l'énergie perdue dans les frottements pariétaux, cause de la perte de charge dans les canaux ouverts.

On notera que le travail des termes de forçage est absent dans les équations de transport de température ou d'énergie interne.

4.1.4 Domaine de calcul

La périodicité imposée suivant les directions longitudinale et transverse impose des contraintes sur le dimensionnement spatial du domaine. On a vu précédemment que d'après les préconisations de Jimenez et Moin [45] le domaine est suffisamment grand pour s'assurer d'un développement non contraint de la turbulence. Cependant, il est nécessaire de le vérifier en analysant les courbes de corrélations des fluctuations de vitesses et de masse volumique dans les directions périodiques, *i.e.* longitudinale et transversale.

Le premier impact de la périodicité longitudinale est la mise en place d'un terme de forçage. La dimension de l'extension longitudinale est surtout liée à un nombre suffisant de structures cohérentes dans l'écoulement qui sont appelées 'streaks'. Elles sont les témoins de la turbulence à proximité de la paroi et jouent un rôle prépondérant dans les transferts thermiques à la paroi. Il est donc nécessaire que le domaine soit suffisamment long pour représenter correctement ce phénomène. La taille des 'streaks' peut être assimilée à une échelle intégrale de l'écoulement dans la direction longitudinale, celle-ci étant définie comme la distance à partir de laquelle la corrélation longitudinale entre les fluctuations de vitesse sont négligeables. Il est possible d'évaluer cette échelle à l'aide des fonctions de corrélation. Schématiquement, une courbe d'autocorrélation prend la forme présentée sur Fig. 4.5 où l'échelle intégrale associée y est représentée. A noter que suivant la distance à la paroi à laquelle les courbes sont calculées, l'échelle intégrale peut évoluer à cause de l'évolution du comportement de la turbulence.



Fig 4.5 – Exemple de courbe d'autocorrélation et échelle intégrale

La fonction d'autocorrélation d'une variable ϕ est donnée par la formule suivante :



Fig 4.6 – Profil de corrélations des fluctuations de vitesse longitudinales suivant la direction longitudinale (x).



Fig 4.7 – Profil de corrélations des fluctuations de masse volumique suivant la direction transverse (z).

Sur les Figs. 4.6, 4.7 et 4.8, les courbes d'autocorrélation des fluctuations de masse volumique et de vitesse longitudinale sont tracées pour différentes valeurs de y^+ dans les directions longitudinale et transversale, respectivement. Les fluctuations de



Fig 4.8 – Profil de corrélations des fluctuations de vitesse longitudinales suivant la direction transverse (z).

vitesse (Fig. 4.6) sont complètement décoréllées à la moitié du domaine témoignant ainsi du bon dimensionnement longitudinal. Dans la direction transversale à partir de 35% d'écart transversal entre les deux points de mesure, les fluctuations (Figs. 4.7 et 4.8) sont complètement décorrélées et le dimensionnement du domaine utilisé est considéré comme suffisant pour ne pas inhiber la turbulence.

Le calcul a été réalisé en utilisant 48 processeurs IBM Power6 du calculateur Vargas de l'IDRIS. Une dizaine de temps caractéristiques, $T_c = U_b/H$, est observée pour que la pseudo-turbulence générée à l'aide de la méthode de Klein [50] puisse se réorganiser. A partir de ce temps, les statistiques sont collectées sur une centaine de temps caractéristiques.

4.1.5 Ecoulement moyen et effets de compressibilité

Les profils moyens de vitesse, température et densité sont présentés sur la Fig. 4.9. Ces résultats montrent un bon accord avec la DNS de Foysi *et al.* [29]. De légères différences sont observées sur les profils des fluctuations lorsqu'ils sont pris indépendamment. Par ailleurs, le profil d'énergie turbulente présente nettement moins d'écart et concorde, cette fois-ci, complètement avec le profil de référence. Cette légère disparité peut être attribuée aux schémas numériques utilisés qui repartiraient l'énergie turbulente légèrement différemment par rapport aux schémas numériques utilisés par Foysi (Adams & Shariff [2] pour les termes convectifs et schéma compact du sixième ordre de Lele [57] pour les termes diffusifs).

Une meilleure compréhension des effets de compressibilité passe par l'étude des variations instationnaires des différentes variables et de leurs interactions. Morkovin [73] a proposé un lien entre les fluctuations de température et les fluctuations de vitesse (Eq. (4.4)). Cette relation est connue sous le nom de la 'Strong Reynolds Analogy' (SRA), est obtenue sous l'hypothèse d'adiabaticité et avec la condition que les fluctuations de température totale soient négligeables par rapport aux fluctuations



Fig 4.9 – Profils moyens de vitesse (a), température et masse volumique normalisées par leurs valeurs à la paroi. Symboles : DNS Foysi *et al.*. Lignes : DNS.

de la température statique. Ainsi, on a :

$$\frac{T'/\langle T\rangle}{(\gamma-1)\langle M\rangle^2 U'/\langle U\rangle} \approx 1 \qquad \text{avec} \qquad \langle M\rangle = \langle U\rangle/\langle c\rangle \quad . \tag{4.4}$$

Dans le cas du canal considéré ici, cette hypothèse ne peut plus être supposée. Des corrections de la SRA ne supposant plus l'adiabaticité ont été proposées par Gaviglio [32], Rubesin [87], et Lechner *et al.* [56]. Dans ces expressions, les fluctuations de température totale ne sont plus négligées.

Le scatter-plot de T' - U' de la Fig. 4.11 confirme cette observation. On peut noter que la SRA est exprimée avec les valeurs locales de température et de vitesses.



Fig 4.10 – Profils moyens des éléments du tenseur de Reynolds (a & b). Symboles : DNS Foysi *et al.*. Lignes : DNS.

A l'aide de la méthode des moindres carrés, le coefficient de proportionnalité est de 0,1505, tandis que la SRA prédit une valeur de 0,1618. Il y a donc environ 7% d'écart. Gaviglio [32], Rubesin [87], et Huang *et al.* [42] ont proposé une expression modifiée :

$$\frac{T'/\langle T\rangle}{(\gamma-1)\langle M\rangle^2 U'/\langle U\rangle} \approx \frac{1}{\alpha(\partial\langle T_0\rangle/\partial\langle T\rangle - 1)}, \qquad (4.5)$$

avec $\alpha_{\text{Gaviglio}} = 1$, $\alpha_{\text{Rubesin}} = 1,34$, et $\alpha_{\text{Huang}} = Pr_t$; $\langle T_0 \rangle$ est la température totale moyenne. Morkovin a supposé une hypothèse très forte pour obtenir la SRA. En l'appliquant à la forme générale de la SRA précédente (Eq. (4.5)), la forme origi-



Fig 4.11 – Scatter plots des fluctuations de température (en haut) et de masse volumique (en bas) en fonction des fluctuations de vitesse à $y^+ = 11$ (a, c) et au centre du canal (b, d).

nale de Morkovin est retrouvée pour $\alpha = -1$. Sur la Fig. 4.12, l'évolution de la température totale moyenne $(\langle T_0 \rangle)$ en fonction de la température statique moyenne $(\langle T \rangle)$ est tracée le long de la direction normale à la paroi. Il est ainsi plus aisé d'évaluer la dérivée $\partial \langle T_0 \rangle / \partial \langle T \rangle$ qui est égale à environ 2,2 à $y^+ = 11$. En proche paroi, cette valeur ne peut plus être négligée ce qui confirme bien que les hypothèses posées par Morkovin ne sont plus applicables dans le cas d'un écoulement avec des parois isothermes.

Rubesin [87] a également proposé une relation linéaire reliant les fluctuations de pression et de masse volumique. En linéarisant cette équation en prenant en compte l'équation d'état, les fluctuations de pression et de température sont aussi linéairement liées.

$$\frac{P'}{\langle P \rangle} = n \frac{\rho'}{\langle \rho \rangle} = (n-1) \frac{\rho T'}{\langle \rho \rangle \langle T \rangle} .$$
(4.6)

Si n = 0, les fluctuations de pression et de masse volumique ne sont pas corrélées, tandis qu'elles le deviennent avec les fluctuations de température. Inversement, si n =1, les fluctuations de pression et de masse volumique sont corrélées mais décorrélées avec les fluctuations de température. Pour vérifier ces relations, les scatter-plots de $P' - \rho'$ et $T' - \rho'$ sont tracés (Fig. 4.13). Ainsi, la corrélation évolue au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la paroi. Au pic de production de l'énergie turbulente situé en $y^+ = 11$, une valeur nulle de n satisfait bien les égalités précédentes. Au



Fig 4.12 – Profil moyen de la température totale moyenne ($\langle T_0 \rangle$) en fonction de la température statique moyenne ($\langle T \rangle$).



Fig 4.13 – Scatter plots des fluctuations de pression (en haut) et de température (en bas) en fonction des fluctuations de masse volumique à $y^+ = 11$ (a, c) et au centre du canal (b, d).

centre du canal, $y^+ = 221$, *n* est égal à 1. Ces observations corroborent bien celles faites par Coleman *et al.* [21].

4.1.6 Analyse du champ instantané

Les valeurs moyennes et les corrélations des fluctuations donnent une première indication sur l'évolution du transfert thermique et son influence sur l'écoulement. Cependant aucune de ces données ne permet de tirer des conclusions quant aux structures tourbillonnaires de l'écoulement.

La vorticité ($\vec{\omega} = 1/2 \ \vec{rot}(\vec{v})$) est un premier outil permettant de déceler ces structures cohérentes. Coleman *et al.* [21] ont démontré l'existence de 'streaks 'uniquement présents à proximité des parois. Sur la Fig. 4.14, ces 'streaks' apparaissent



Fig 4.14 – Champs de la composante normale à la paroi de la vorticité .

clairement en étant très proches de la paroi et correspondent à des petits tourbillons tournant sur l'axe normal à la paroi et convectés le long de la canal. Ces structures cohérentes sont également très importantes pour le dimensionnement du domaine. Elles sont l'explication physique des fonctions d'autocorrélations longitudinales étudiées précédemment. Les plus grandes structures observables ont une longueur d'environ la moitié de la longueur du domaine de calcul, ce qui confirme bien le bon dimensionnement conclu précédemment.

L'étendue spatiale des structures cohérentes en proche paroi est aisément visualisable grâce à des isosurfaces de la composante normale à la paroi $(\vec{rot}(\vec{v}).\vec{y})$ de la vorticité. Le choix d'une valeur positive et négative permet de dissocier les deux sens de rotation et ainsi visualiser l'organisation des structures (Fig. 4.15). Ces structures se disposent comme des engrenages. Entre chaque rouleau de vorticité positive, un rouleau de vorticité négative est présent. La hauteur de ces isosurfaces est due aux transferts thermiques qui produisent un mouvement de fluide de la paroi vers le centre du canal et donc à tendance à étirer ces structures. Ce mouvement est particulièrement visible sur la Fig. 4.16 où la composante transversale du rotationnel $(\vec{rot}(\vec{v}).\vec{z})$ souligne ce mouvement d'échange thermique.

Un autre critère aussi utilisé pour identifier les structures cohérentes est celui proposé par Dubief et Delcayre [23] défini par :

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij} \Omega_{ij} - S_{ij} S_{ij}) , \qquad (4.7)$$

et correspond au deuxième invariant du tenseur de déformation. En choisissant des valeurs positives (resp. négatives), les structures où la rotation (resp. l'étirement) est prépondérante sont mises en valeur. A l'aide d'une analyse dimensionnelle de ce critère, il est possible d'évaluer une valeur critique avec les principaux paramètres de l'écoulement.



Fig 4.15 – Isosurfaces de la composante normale à la paroi de la vorticité (négative en bleu et positive en rouge).



Fig 4.16 – Contours de la composante transversale de la vorticité dans un plan longitudinal.

$$Q_c = \left(\frac{U_b}{2H}\right)^2 \tag{4.8}$$

L'isosurface Q_c (Eq. (4.8)) est tracée sur la Fig. 4.17 et deux types de structures ressortent majoritairement : d'un coté, les structures longitudinales comme celles précédemment étudiées par Jimenez *et al.* [46] et de l'autre, des structures en forme de fer à cheval observées par Ringuette *et al.* [83] dans le cas d'une couche limite supersonique (M = 3). En combinant les isosurfaces de vorticité avec les isosur-



Fig 4.17 – Iso-surface du critère Q coloriée par la température.

faces Q, on peut suivre l'évolution du fluide autour de ces deux types de structures. Au cours du temps, les structures en forme de fer à cheval sont convectées le long



Fig 4.18 – Evolution temporelle d'une iso-surface du critère Q coloriée par la température et d'une coupe de température. Une structure en fer à cheval est mise en valeur par un cadre noir afin de mieux suivre son évolution temporelle.

de l'écoulement comme l'illustre la Fig. 4.18. Ainsi, sur la Fig. 4.19, une structure de ce type est isolée pour être plus facilement étudiée. De par son extension verticale, elles se situent complètement dans la zone logarithmique de la couche limite (Fig. 4.19(a)) : les branches sont dans la partie basse ($y^+ \approx 40$), tandis que le sommet se situe dans la partie haute ($y^+ \approx 190$). Il s'agit donc d'une structure qui participe grandement à l'échange thermique entre les parties chaudes (centre du canal) et froides (proche paroi) grâce à une grande amplitude spatiale. De plus, elle subit une force de cisaillement car ces deux principales parties se situent dans des zones de vitesse très différentes (Fig. 4.19(b)) ce qui produit aussi cet étirement longitudinal qui peut être une des causes de sa destruction.

Sur la Fig. 4.19(c)), les vecteurs vitesses (uniquement dans le plan (y-z)) ont été rajoutés sur la surface afin d'identifier plus facilement le sens de rotation du fluide dans la structure. On remarque que le sens de rotation est conservé tout au long de la structure. De plus, cela permet un entrainement du fluide froid proche de la paroi vers le fluide chaud au plus près du centre du canal (Fig. 4.19(d)) confirmant l'apport important de ce type de structure dans le transfert thermique.

Le mécanisme de naissance de ces structures en forme de fer à cheval est illustré sur la Fig. 4.20(a-e). Le germe (Seed sur Fig. 4.20(a)) provient d'une structure longitudinale qui est entraînée par la structure voisine de rotation opposée (Fig. 4.20(a)), appelée CS pour plus de clarté. La différence dans le rôle de ces structures se fait



Fig 4.19 – Structure en fer à cheval coloriée par la hauteur en unité de paroi (y^+) , par la vitesse longitudinale (b), avec les vecteurs vitesse (c) et avec des vecteurs vitesse et des contours de température compris entre 500 K et 680 K (d).

par leurs énergies. Le germe a une énergie plus faible que celle de CS, car elle a une taille plus grande pour une même isosurface du critère Q. De par l'unité de Q (s²), plus la structure est grande plus elle a une fréquence caractéristique faible et donc une énergie supérieure. Une extrémité du germe (A) est engrenée par la CS (Fig. 4.20(b)). Au cours de son mouvement, la première partie du germe s'enroule autour de CS. Pour minimiser l'énergie dissipée par les frottements dus au mouvement engagé, elle effectue une rotation de 90° pour se retrouver suivant l'axe transverse 'z' (Fig. 4.20(c)). Lors de la redescente, le phénomène inverse se passe et le germe redescend dans une zone de basse vitesse par l'entrainement autour de la CS et se remet dans le sens longitudinal à cause du cisaillement occasionné par le changement de vitesse. La structure ainsi formée est convectée et étirée jusqu'à sa destruction (Fig. 4.20(d & e)). Si la structure centrale n'est pas assez énergétique alors un autre type de structure se forme comme celle encadrée sur la Fig. 4.21

4.1.7 Frottement pariétal en fonction du nombre de Reynolds

Dans la simulation présentée précédemment, les valeurs caractéristiques telles que Re=3000 et $\Phi = 26 \text{ kW.m}^{-2}$ sont très éloignées des valeurs communément admises dans les canaux de refroidissement des moteurs fusées (Re $\approx 10^9$ et $\Phi =$ 80 W.m⁻²). La prise en compte d'une pression plus élevée augmentera le nombre de Reynolds mais aussi réduira les échelles de la turbulence, car la viscosité cinématique ν est inversement proportionnelle à la pression. Tous ces paramètres ont pour conséquence de rendre impossible l'utilisation dans une DNS à haute pression d'une grille confectionnée pour une DNS à plus basse pression.



(a)



(b)



(c)

Fig 4.20 – Mécanisme de naissance des structures en forme de fer à cheval. (Partie 1)

En effet, en première approximation un minimum de trois points est requis dans la zone $y^+ \leq 10$ pour bien décrire les phénomènes pariétaux. Ainsi, la connaissance de y_{10}^+ , c'est-à-dire aussi le nombre total de points dans le domaine pour avoir une définition suffisante pour une résolution type DNS, nécessite la connaissance du nombre de Reynolds basé sur le vitesse de frottement, Re_{τ} .



(d)



(e)

Fig 4.20 – Mécanisme de naissance des structures en forme de fer à cheval. (Partie 2)



Fig 4.21 – Structure en demi fer à cheval (encadrée).

Pour estimer l'évolution de Re_{τ} en fonction de la pression, de nombreuses simulations basées sur l'approche MILES (LES sans modèle de sous-maille) ont été réalisées. Cependant, un maillage très fin est appliqué à proximité de la paroi pour respecter les contraintes de la DNS. Ces simulations sont basées sur la configuration du canal de Foysi *et al.* [29], les profils initiaux de vitesse et de température sont les mêmes. L'étude est réalisée avec deux fluides différents : le diazote (N₂) et le dihydrogène (H₂); les flux thermiques à la paroi sont évalués de la manière suivante : $\Phi_w = \mu_w \gamma C_v (T_w - T(y_1))/(y_1 P_r)$ (voir tableau 4.4) où P_r est le nombre de Prandtl.



Fig 4.22 – Evolution de Re_{τ} en fonction de la pression (en bar) pour de l'azote et de l'hydrogène pour un nombre de Mach constant et un nombre de Reynolds constant.

Le tracé de la courbe de $R_{e_{\tau}}$ en fonction de P en échelle log-log (voir Fig. 4.22) montre une corrélation linéaire qui peut être estimée à l'aide de la méthode des moindres carrés. Les relations obtenus sont de la forme suivante :

$$\operatorname{Re}_{\tau}^{N_2 H=6,8mm} = 1554.84 P^{0,50776}$$
 et $\operatorname{Re}_{\tau}^{H_2 H=6,8mm} = 515.34 P^{0,49909}$ (4.9)

Les deux courbes sont quasi-parallèles et l'exposant obtenu pour la pression est proche de 0.5. En généralisant, $R_{e_{\tau}}$ peut être exprimé de la manière suivante :

$$R_{e_{\tau}} = C P^{0,5} ,$$

où C est une constante qui dépend au minimum des propriétés du fluide et de la dimension du canal. Ainsi, $y^+ = 10$ peut être facilement évalué grâce à :

$$y(10) = 10H/R_{e_{\tau}}$$
.

Cependant, les valeurs de $R_{e_{\tau}}$ obtenues dans le tableau 4.4 conduisent à des nombres de mailles qui sont encore inaccessibles pour un calcul DNS. Ainsi, un calcul a été réalisé avec un canal plus petit de demi hauteur égale à 1 mm à la place de 6,8 mm. La pression choisie est de 3 bars afin d'évaluer la constante C et ainsi prédire le nombre de Reynolds de frottement pour une autre pression. Le résultat du calcul donne la relation suivante pour ce canal $Re_{\tau}^{N_2 \ h=1mm} = 573,40 \ P^{0,5}$. A l'aide de cette relation, la taille de la première maille à la paroi doit être de 0,581 μ m pour une pression de 100 bars.



Fig 4.23 – Evolution de Re_{τ} en fonction du nombre de Reynolds pour de l'azote et de l'hydrogène pour un nombre de Mach constant.

De la même manière, l'évolution du nombre de Reynolds de frottement en fonction du nombre de Reynolds nominal (Fig. 4.23) suit aussi une loi logarithmique mais cette fois-ci la constante semble être indépendante de l'espèce employée.

$$\operatorname{Re}_{\tau} = 4.5 \ \operatorname{Re}^{0.5}$$
 (4.10)

Une autre information extraite du tableau 4.4 est la valeur asymptote que le flux atteint lorsque la pression augmente. Les limites atteintes sont équivalentes pour les deux espèces considérées dans cette étude à savoir 260 kW.m⁻² et 300 kW.m⁻² pour l'azote et l'hydrogène respectivement.

Une autre étude, résumée dans le tableau. 4.5, a été réalisée pour connaitre l'influence de la pression en maintenant le nombre de Reynolds constant, car dans l'étude précédente le nombre de Reynolds augmentait avec la pression via la masse volumique. Une tendance à un comportement logarithmique a aussi été trouvée mais cette fois-ci décroissant (Fig. 4.22) :

N₂ à Re=1,1 10⁶ : Re_{$$\tau$$} = 7782,45 P^{-0,15485}.

et H₂ à Re= 1,1 10⁵ : Re_{$$\tau$$} = 1934,25 P^{-0,10402}

Cette relation est aussi utile pour dimensionner un maillage pour des méthodes de type LES ou RANS. En effet, spécialement pour les LES, il est important que la grille respecte les conditions du modèle de sous-maille. Typiquement, pour ce type de simulation, la hauteur de la première maille doit être d'environ 5 mailles dans la zone visqueuse et la zone tampon ($y^+ < 20$). De plus la présence d'une loi de paroi peut aussi imposer la disposition de ces premières mailles de la grille de calcul afin de respecter des pré-requis du modèle de sous-maille.

4.2 Simulation aux Grandes Echelles

4.2.1 Mise en place des simulations

L'utilisation des simulations aux grandes échelles permet de réduire considérablement le coût de calcul pour des cas à haute pression, grâce à un nombre de mailles raisonnable. Cependant, il convient de prendre en compte un modèle de sous-maille pour prédire le comportement des petites échelles non résolues par la grille. Dans ce travail, les modèles aérodynamiques SGS de Smagorinsky et Germano-Lilly et les modèles SGS thermiques à Prandtl turbulent constant et dynamique sont testés. A noter que d'autres modèles de sous-mailles proposés par Sagaut [88] et Ta Phuoc [102] et une approche hybride de Bardina *et al.* [4, 5] ont été testés par Lenormand *et al.* [58]. Il s'agit de modèles de sous-mailles prenant en compte deux échelles de turbulence, une grande et une petite, pour quantifier la viscosité de sous-maille.

Les principales données de la simulation sont résumées dans le tableau suivant : Comme il s'agit d'une étude paramétrique sur les modèles de sous-mailles, le maillage DNS a été retravaillé pour compter moins de maille. Malgré tout, un raffinement à proximité des parois a été gardé pour s'assurer d'avoir une résolution correcte des phénomènes pariétaux. Dans l'étude DNS précédente, un terme de forçage a été introduit dans les équations de quantité de mouvement et d'énergie totale pour assurer la conservation du débit et la pression globale de l'écoulement. Ce terme de forçage est évalué suivant la procédure proposée par Morinishi *et al.* [72] à partir du frottement pariétal. Celui-ci est évalué exactement dans le cas des DNS, mais dans le cas d'une simulation aux grandes échelles ce frottement n'est pas entièrement résolu car une partie est introduite par le modèle de sous-maille. Il est ainsi nécessaire d'apporter quelques modifications au terme de forçage pour tenir compte de ces nouvelles contraintes.

Correction du terme de forçage

L'opération de filtrage, explicitée dans le paragraphe sur les équations régissant la simulation des grandes échelles, est également appliquée sur le terme de forçage f_i .

$$\overline{\rho f_i} = \overline{\rho} \widetilde{f_i} = -\overline{\rho} \frac{\widetilde{\tau}_{aw} \delta_{i1}}{H \rho_m} \tag{4.11}$$

Comme dans le cas de la modélisation des termes filtrés des équations de Navier-Stokes, le terme $\tilde{\tau}_{aw}$ ne peut être exprimé à partir des valeurs résolues dans la simulation. Une modélisation de sous-maille est alors requise pour compenser la perte d'information. Il convient de ne pas la négliger car la formulation du terme de forçage exprimée à partir des valeurs filtrées (c'est-à-dire à partir de $\check{\tau}_{aw}$) ne suffirait pas à compenser complètement les pertes dues au frottement pariétal.

$$\overline{\rho f_i} = \overline{\rho} \widetilde{f_i} = -\overline{\rho} \left(\frac{\check{\tau}_{aw} \delta_{i1}}{H \rho_m} + SGS \right)$$
(4.12)

Sans ce terme de sous-maille, un gradient de pression longitudinale se mettrait en place à cause de la trop faible valeur du terme de forçage. Comme la simulation est périodique dans la direction longitudinale, la pression moyenne dans le domaine, au cours du temps, chutera à cause de la perte de charge résiduelle. Grâce à cette remarque, une modélisation du terme de sous-maille de forçage est proposée. Il s'agit de l'évaluer en calculant la dérive temporelle de la pression moyenne dans le domaine. Pour rester homogène avec le reste de l'équation, l'expression est divisée par la longueur du domaine. On obtient ainsi :

$$SGS = \frac{\frac{1}{V} \left[\int_{V} \overline{p} dV \right]_{t=0} - \frac{1}{V} \left[\int_{V} \overline{p} dV \right]_{t}}{L_{x}}$$
(4.13)

Les résultats ont montré une très bonne conservation du débit en perdant moins de 1% de la vitesse débitante après plus de 100 T_{caract} (avec $T_{caract} = H/U_b$). Dans la littérature, la méthode la plus communément utilisée consiste en un suivi dynamique du débit pour imposer le terme de forçage [11, 58].

4.2.2 Comparaison des modèles de sous-maille

Dans les simulations réalisées, quatre couples de modèles de sous-mailles ont été testés :

- Smagorinsky, Prandtl turbulent constant,
- Germano, Prandtl turbulent constant,
- MILES,
- Germano, Prandtl turbulent dynamique.

L'utilisation du seul modèle dynamique de Prandtl turbulent avec le modèle dynamique de Germano provient du surcoût engendré par ces procédures dynamiques. En effet, le modèle de Prandtl turbulent variable nécessite l'utilisation d'une opération de filtrage au niveau test qui n'est pas présent dans le modèle de Smagorinsky. En l'associant au modèle de Germano, cette procédure de filtrage est déjà utilisée et certaines valeurs sont communes aux modèles de Germano et de Prandtl turbulent réduisant alors la surcharge.

Sur la Fig 4.24, les profils de vitesse normalisée sont tracés. Il s'agit des profils ayant subi la transformation de van Driest. Elle permet de prendre en compte les effets de variation de masse volumique et aussi de faire apparaître les différentes zones des couches limites : la sous-couche visqueuse, la zone tampon et la zone logarithmique.

$$U_{VD}^{+} = \int_{0}^{U^{+}} \sqrt{\frac{\langle \rho \rangle}{\langle \rho_{w} \rangle}} dU^{+}(y^{+})$$
(4.14)

Ces trois zones suivent des lois d'évolution :

- la sous-couche visqueuse $(y^+ < 10)$ dans laquelle les effets visqueux sont prédominants. La vitesse longitudinale évolue linéairement en fonction de la distance à la paroi.

$$U_{VD}^+(y^+) = y^+ \tag{4.15}$$



Fig 4.24 – Profil de vitesse moyenne normalisée suivant la direction normale à la paroi dans les unités proche-paroi.

- la zone tampon dite aussi de transition $(10 < y^+ < 30)$ dans laquelle la production de turbulence est maximale.
- la zone logarithmique $(y^+ > 30)$ dans laquelle la vitesse longitudinale suit une loi de type logarithmique de la forme suivante :

$$U_{VD}^+(y^+) = \frac{\ln(y^+)}{A} + B$$
 avec $A = 0.41$ et $B = 6.9$. (4.16)

Il faut noter que Chassaing [18], dans le cas des couches limites, propose une décomposition équivalente, mais alors le coefficient B est égal à 5,2. Pour illustrer ce point, une simulation encore plus résolue a été réalisée. Le point de départ a été la DNS présentée précédemment. Le nombre de points a été doublé dans les directions transverse et longitudinale et triplé dans la direction normale à la paroi et le maillage compte alors près de 44 millions de cellules. Les résultats obtenus sont exactement les mêmes que ceux obtenus avec le maillage original et donc confirme bien la valeur de 6,9 pour B. Cette différence de valeur peut être due au confinement de l'écoulement qui doit augmenter sa vitesse centrale pour garder la valeur imposée de débit ou à la condition d'isothermie aux parois.

- Dans la zone visqueuse $(y^+ < 10)$, les trois couples de modèles retranscrivent de la même manière le profil de vitesse. Ici, l'influence du modèle de sous-maille est relativement limité car les effets visqueux y sont prédominants.
- Dans la zone tampon (10 < y^+ < 30), des différences commencent à apparaitre. Celles-ci restent cependant très faibles.
- Dans la zone logarithmique, les modèles se différencient nettement. Tous les résultats obtenus avec le modèle de Prandtl turbulent constant montrent une forte erreur à partir de $y^+ = 100$. Elle s'apparente à la zone de sillage présente sur le profil d'une couche limite turbulente comme observé par Laurent [55]. Indépendamment de cette différence, les profils de vitesse sous-entendent une viscosité trop forte introduite par les modèles de sous-mailles. Avec le modèle de Prandtl turbulent dynamique, la zone de sillage observée disparait et le

profil de vitesse revient plus proche de la référence. A noter qu'en l'absence de modèle de sous-maille (MILES), la zone de sillage est toujours présente, ce qui tend à conclure que l'influence de la mauvaise résolution des effets thermiques de sous-mailles influence l'aérodynamique du canal. Seule une bonne évaluation du transfert thermique de sous-maille, via un Prandtl turbulent variable, permet de bien capter la couche limite dynamique. Sur la Fig. 4.25, cette variation du Prandtl turbulent est particulièrement sensible. Proche de la paroi avec l'utilisation d'un Prandtl turbulent constant, le flux thermique de sous-maille est surestimé, tandis qu'au centre du canal il est sous-estimé.



Fig 4.25 – Profil du Prandtl turbulent moyen (noir : Prandtl turbulent variable, rouge : Prandtl turbulent constant).

Des conclusions équivalentes peuvent être faites en considérant les résultats obtenus pour les fluctuations de vitesses (Fig. 4.26). Comme pour les profils de vitesse, une différence importante existe entre les résultats obtenus avec les modèles thermiques choisis. Avec le Prandtl turbulent constant, les résultats ne sont pas symétriques et les amplitudes ne sont pas bonnes. Comme attendu, l'approche dynamique permet de retrouver les bons résultats. La symétrie est retrouvée en utilisant le modèle thermique dynamique. Les conclusions sont identiques en analysant le frottement turbulent $\widetilde{u'v'}$ (Fig. 4.27). Grâce au modèle de Prandtl turbulent dynamique, la pente de frottement classiquement obtenue est bien évaluée, tandis que tous les autres couples de modèles de sous-mailles sous-évaluent d'environ 50%.

4.3 Conclusion

Dans cette partie, un canal supersonique a été étudié d'abord en DNS puis en LES. La DNS a permis d'analyser en détails les corrélations entre les fluctuations aérothermodynamiques et les structures cohérentes. Cet aspect a permis d'aborder les effets de compressibilité, notamment la relation proposée par Morkovin et toutes ses variantes développées pour combler sa non-application dans le cas des écoulements non-adiabatiques. Concernant les structures cohérentes et leurs agen-



Fig 4.26 – Profil moyens de $\langle \overline{\rho} \rangle \left\langle \widetilde{u'u'} \right\rangle$ pour différents couples de modèles de sous-mailles.



Fig 4.27 – Profils moyens $\langle \overline{\rho} \rangle \left\langle \widetilde{u'v'} \right\rangle$ pour différents couples de modèles de sous-mailles.

cements, l'étude de l'écoulement instationnaire, à l'aide d'isosurfaces de vorticité et de critère Q, a permis de cerner leurs comportements et leurs effets sur le transferts thermiques dont elles sont le vecteur de transmission. Le chronologie de création de structures fer à cheval a aussi pu être analysé et un mécanisme a été proposé.

Par la suite, ce même canal a été étudié en LES. L'objectif de cette partie était de tester et quantifier les apports d'une approche dynamique pour évaluer le nombre de Prandtl turbulent. Les résultats ont montré un grand impact sur les profils moyens de l'utilisation de cette approche variable. Les autres formulations ne permettant pas de retrouver ni la symétrie des résultats, ni les bonnes amplitudes tant pour le profil moyen de vitesse que pour les fluctuations.

numéro de la maille	$\Delta y \ (\mathrm{mm})$	Hauteur cumulée (mm)	y^+
1	0,026025	0,026025	0,84
2	0,027016	0,053041	1,71
3	0,028062	0,081104	2,61

Tableau 4.3 – Taille et hauteur cumulée des trois premières mailles.

	$N_2, M=1,27$			H ₂ , M=0,33		
P (bar)	Re	Re_{τ}	$\Phi_w \; (\mathrm{kW.m^{-2}})$	Re	Re_{τ}	$\Phi_w \; (\mathrm{kW.m^{-2}})$
0.03	3000	234	143	380	88	167
0.3	31000	895	180	3800	283	210
1	104000	1803	190	12700	530	250
3	304800	2784	320	37500	925	300
10	1016500	4913	260	127300	1624	250
13	1314500	5507	270	165300	1805	235
20	2009000	6660	260	253860	2270	278

Tableau 4.4 – Tableau pour l'azote (à gauche) et l'hydrogène (à droite) pour un nombre de Mach constant.

	N_2 ,	Re=1,1	10^{6}		H_2, F	Re=1,1	10^{5}
P (bar)	M	Re_{τ}	$\Phi_w \; (\mathrm{kW.m}^{-2})$	P (bar)	М	Re_{τ}	$\Phi_w \; (\mathrm{kW.m^{-2}})$
20	0.96	4715	107	3	1.1653	1723	1270
40	0.47	4186	45	10	0.3478	1528	228
100	0.2	3950	25	20	0.1746	1413	161

Tableau 4.5 – Tableau pour l'azote et l'hydrogène avec un nombre de Reynolds constant.

$N_x \times N_y \times N_z$	pression moyenne	H (mm)
$100 \times 100 \times 100$	3300 Pa	$6,\!84355$
Δy_{min}^+	$U_{ au}$	$\Phi_w(kW.m^{-2})$
1.28	$36.25 \ m.s^{-1}$	26

Tableau 4.6 – Principaux paramètres des simulations aux grandes échelles.

Canaux avec fluide supercritique

Dans le précédent chapitre, seule la problématique des transferts thermiques a été étudiée. Dans ce chapitre, une première tentative de simulation des canaux de refroidissement de moteurs-fusées est réalisée. Pour cela, le code de calcul a été changé car les approches adaptées aux écoulements compressibles supersoniques sont très lourdement pénalisées dans les cas subsoniques. Ce nouvel outil, PPMBFS, dispose des méthodes permettant de résoudre les écoulements avec des fluides supercritiques, mais présentent aussi des désavantages qui seront abordés et discutés.

Pour des raisons de confidentialité, ce chapitre a été retiré de la version publique du manuscrit.

Conclusions et perspectives

Sommaire

6.1	Conclusions	89
6.2	Perspectives	91

6.1 Conclusions

Ce travail de thèse a pour objet l'étude des écoulements turbulents dans les canaux de refroidissement des moteurs fusées. Ces canaux sont parcourus par un fluide supercritique (hydrogène par exemple) qui se réchauffe au fur et à mesure de son parcours le long de la chambre de combustion. Leur dimensionnement (facteur de forme, type de fluide, débit admissible, pertes de charges) est dicté pour le moteur Vulcain 2 à la tenue de la chambre de combustion. Dans le cas du cycle 'expander' (moteur Vinci), ces canaux sont aussi responsables de la bonne alimentation du moteur en combustible car directement liés aux turbo-pompes. Cette thèse a pour objectif de donner une meilleure compréhension des transferts thermiques en proche paroi au moyen de la simulation numérique. Les dimensions caractéristiques de la turbulence sont directement liées au niveau de pression : plus celle-ci est élevée plus les échelles turbulentes sont petites. La résolution complète étant encore aujourd'hui inaccessible, il faut donc s'orienter vers des solutions moins coûteuses mais toujours précises, telle que la simulation aux grandes échelles. Cette méthode nécessite cependant l'utilisation de modèles de sous-mailles pour combler la perte d'information due à la résolution partielle de la turbulence. Ici la problématique thermique étant prédominante, une attention particulière a été apportée au modèle de sous-maille thermique. Afin de confirmer son intérêt, une validation a été mise en place avec pour cas-test un canal supersonique périodique, permettant de s'affranchir des difficultés de traitement des ondes acoustiques. Celui-ci sera d'abord résolu en DNS puis en LES afin de tester les différentes solutions de modèles de sous-mailles. Cependant, le schéma originel, WENO5, ne disposait pas de la précision suffisante pour l'étape DNS de référence.

Pour cela, le troisième chapitre porta sur les différents points de l'amélioration du schéma numérique originel, WENO5, via les modifications développées par Martìn et son équipe [65, 105]. Ce nouveau schéma, WENO5-SOL, a été testé avec des configurations académiques telles que le tube à choc de Sod, convection d'une discontinuité de contact, le test de Shu-Osher, ou la focalisation d'un choc sur une paroi concave. Ce dernier point a permis de mettre en avant toutes les qualités du schéma : aussi bien sa robustesse qui est intrinsèque à la formulation WENO, que sa précision permettant ainsi de définir les structures turbulentes les plus fines. Il devient alors possible de réaliser une DNS avec un schéma très précis tout en s'assurant de sa robustesse lors de la présence de fort gradient, garantissant alors une bonne stabilité

Dans le quatrième chapitre, un canal supersonique a été étudié grâce à deux méthodes de résolution. Dans un premier temps l'aide de la méthode DNS, l'écoulement a pu être analysé aussi bien au niveau des corrélations entre les fluctuations aérothermodynamiques que des structures cohérentes vecteurs du transfert thermique pariétal. Ce premier aspect a permis de prendre en compte les effets de compressibilité, notamment la relation proposée par Morkovin et toutes ses variantes développées pour combler sa non-application à des écoulements non-adiabatiques. Les structures cohérentes ont aussi été étudiées précisément à l'aide d'isosurfaces de vorticité et de critère Q. Deux principaux types ont été relevés : d'une part les structures longitudinales (ou 'streaks') et d'autre part les structures en forme de fer à cheval. Le mécanisme de naissance de ces dernières a aussi été observé avec soin montrant l'importance des 'streaks'. En effet, les structures en fer à cheval sont produites à partir de l'enroulement d'un 'streak' de faible énergie autour d'un autre d'énergie plus élevée.

Dans un second temps, ce même canal a été étudié avec la méthode LES. L'objectif de cette partie est d'évaluer la qualité des modèles de sous-mailles. De plus avec le fort aspect thermique, la prise en compte des flux thermiques de sous-mailles revêt une importance cruciale encore plus importante en proche paroi. Un modèle thermique proposé par Moin [70] a été testé et est basé sur une approche dynamique. Les résultats obtenus, avec ce modèle thermique couplé à un modèle dynamique pour les termes aérodynamiques, sont bien meilleurs que ceux obtenus avec les autres modélisations.

Dans les précédentes études, le schéma WENO a été développé pour les gaz parfaits. Toute la théorie présentée dans le deuxième chapitre utilise très souvent des simplifications rendues possibles pour les gaz parfaits. Avec la thermodynamique supercritique, il conviendrait de reprendre complètement les équations sans supposer d'hypothèses quant à la loi d'état. De plus dans les fluides cryogéniques, les vitesses du son sont très élevées rendant la plupart des applications fortement subsoniques. Ainsi, les approches complètement explicites comme celles de CHOC-WAVES se trouvent extrêmement pénalisées dans les écoulements fortement subsoniques. Nous disposions au laboratoire du code de calcul, PPMBFS, dédié aux écoulements avec des fluides supercritiques. Celui-ci dispose d'une méthode de préconditionnement permettant de simuler plus aisément les écoulements subsoniques compressibles. De plus, tous les développements spécifiques à la thermodynamique des gaz réels y sont inclus. Une validation a été effectuée sur un cas-test se situant à la croisée des capacités des deux codes de calculs. Il est basé sur le précédent canal supersonique étudié (Foysi et al.). Les résultats obtenus montrent des différences dans la prise en compte de la perte de charge. Plusieurs raisons ont été évoquées telles que des méthodes numériques plus dissipatives de PPMBFS, beaucoup de paramètres de réglages (viscosité artificielle, préconditionnement), et enfin une loi d'état de SRK qui ne dégénère pas complètement pour un cas gaz parfait à très faible pression. Cependant, ces différences ne modifient pas totalement la compréhension de l'écoulement et le code de calcul avait déjà été validé pour des applications avec des gaz supercritiques.

Dans le cinquième chapitre, la problématique des fluides supercritiques a été abordée en simulant le canal expérimental EH3C. Il permet d'étudier l'écoulement d'hydrogène ou de méthane à haute pression soumis à un fort transfert thermique à la paroi. Les résultats expérimentaux sont difficilement exploitables pour la comparaison avec les résultats numériques présentés. En effet, les mesures de température sont réalisées et aucune information directe n'est disponible pour l'écoulement. Une étude quantitative a cependant été réalisée sur les structures turbulentes dans le canal. De plus afin de d'étendre le champ d'investigation, le comportement de l'oxygène a été simulé dans des conditions identiques à celles du méthane car ils ont des pressions et températures critiques semblables. Les résultats ont permis de voir que les structures cohérentes présentes dans le canal sont très clairement thermo-dépendantes. En effet, une modification du critère Q en prenant en compte l'effet thermique permet de faire apparaitre simultanément les structures proches du mur chaud inférieur et du mur adiabatique supérieur. D'importantes différences ont été relevées par rapport à celles observées dans le canal supersonique étudié. En effet, le mécanisme de naissance des structures en fer à cheval est complètement annihilé par le confinement important du canal. Le transfert thermique est alors fortement modifié.

Les transferts thermiques peuvent aussi être étudiés à l'aide du nombre de Nusselt, pour lequel plusieurs corrélations ont été développées dans le cas d'un écoulement d'hydrogène supercritique au-dessus d'une plaque plane. Différentes versions ont été présentées. Celle proposée par Miller permet ainsi d'obtenir des flux thermiques correspondants aux valeurs données par les expérimentateurs du banc EH3C. Par la simulation numérique, le nombre de Nusselt retrouvé est bien plus faible que celui annoncé par la corrélation. Plusieurs pistes peuvent être énoncées pour justifier cette différence. La corrélation n'est pas prévue pour les canaux et encore moins pour ceux à fort facteur de forme. Le Nusselt retrouvé à partir de la simulation n'est qu'une valeur résolue par la LES. Il ne contient pas toute l'information en particulier l'information modélisée.

6.2 Perspectives

Dans les écoulements supercritiques, d'importants gradients sont présents de par la forte non-linéarité de l'équation d'état. Pour réaliser des simulations numériques de haute fidélité d'écoulement avec ce type de fluide, des schémas numériques très précis mais aussi robustes doivent être utilisés. Ces deux qualités antinomiques nous ont orienté vers les schémas à capture de choc. Dans ce travail de thèse, le schéma WENO5-SOL a été utilisé et a montré une grande précision pour décrire les phénomènes physiques tout en assurant une grande robustesse dans les zones de chocs ou de forts gradients. Les simulations ont été réalisées pour des écoulements en supposant une loi d'état de gaz parfait. Pour les écoulements supercritiques, il serait possible de les résoudre avec le schéma de type WENO en redéveloppant sans hypothèses les diverses matrices intervenant dans le passage à l'espace caractéristique.

Parmi les perspectives de ce travail, les deux premières étapes de ce travail ont été réalisées dans des cas-test supposant une loi d'état de gaz parfait. La validité des modèles de sous-mailles dans le cas d'écoulements supercritiques laisse encore à désirer. Le développement de modèles adaptés aux LES de fluide supercritique est donc un point important. Comme souvent conclu dans la bibliographie et aussi conclu dans ce manuscrit, les approches dynamiques montrent une grande précision aussi bien pour la fermeture des termes aérodynamiques que thermiques. Il serait alors utile de définir un cas d'étude avec un fluide supercritique permettant d'être résolu par la DNS, puis en LES. Le filtrage des résultats DNS permettrait de construire de nouveaux modèles sous-mailles. De plus, le filtrage au sens de Favre, utile en gaz parfait pour éviter la présence de termes de sous-mailles dans l'équation d'état, perd son intérêt dans le cas d'une équation d'état de gaz réels. De plus, les termes de sous-mailles négligés comme proposé par Vreman peuvent ne plus l'être pour ce type d'écoulement. C'est pour cela que les simulations aux grandes échelles d'écoulements avec des fluides supercritiques nécessitent un grand effort de recherche tant au niveau des modèles de sous-maille que des schémas numériques permettant de garantir précision et robustesse. De premières études en ce sens ont été menées par Selle et Bellan [89].

Enfin, toutes les problématiques concernant le nombre de Nusselt tant au niveau des corrélations empiriques pour des canaux fortement confinés que des contributions de sous-mailles méritent d'être étudiées plus en profondeur. Aujourd'hui les configurations géométriques des moteurs-fusées sont dictées par des critères de dimensionnement au col. Il en résulte un très fort facteur de forme confinant fortement l'écoulement et impactant aussi les structures turbulentes vecteurs du transfert thermique. Ainsi, il est légitime de conjecturer que le nombre de Nusselt peut être une fonction de ce confinement. Les corrélations présentées ne tiennent pas compte de ce facteur important. Une étude plus poussée aussi sur cet aspect peut être effectuée pour confirmer ou infirmer cette dépendance.

Liste des illustrations

1.1	Décollage de la fusée Ariane 5 ECA le 19 avril 2008. Crédits CNES.	7
1.2	Moteur cryotechnique Vulcain 2 (a) et un schéma de son principe de	
	fonctionnement (b).	8
1.3	Phénomène de 'Dog House' d'un canal déformé à cause d'un sous-	
	dimensionnement du flux thermique	9
1.4	Moteur cryotechnique Vinci (a) et un schéma de son principe de fonc-	
	tionnement : cycle 'expander'(b). \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	10
1.5	Diagramme pression-température avec son point critique (C) et sa	
	zone supercritique.	11
1.6	Schéma de l'installation expérimentale HARCC	12
1.7	Schéma de l'installation expérimentale EH3C. (extrait de Quering <i>et</i>	
	al. [80])	12
1.8	Schéma montrant l'effet des trois niveaux de description sur un signal	
	de vitesse. (Figure tirée de Roux, 2007 [86])	13
1.9	Illustration de la transition du régime laminaire au régime turbulent	
	d'un écoulement au dessus d'une plaque plane. Extrait de [110]	14
1.10	Schéma de principe de la LES. (Figure tirée de Pope, 2000 [79])	15
1.11	Exemples de cellules convectives de Rayleigh-Bénard	19
1.12	Evolution temporelle d'un écoulement de CO_2 supercritique par effet	
	de chauffage pariétal de 1 mK avec quelques isosurfaces de température.	
	(Extrait de Accary <i>et al.</i> $[1]$) \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	20
1.13	(a) : Imagerie instantanée Raman d'un jet d'oxygène liquide (point	
	C60 du banc MASCOTTE); (b) Exemple d'une imagerie instantanée	
	Raman d'un jet d'oxygène liquide et le profil de l'impulsion laser	
	correspondante. (tirées de Cessou <i>et al.</i> [17])	21
21	Champ du facteur de compressibilité du CH4 pour des pressions de 1	
2.1	à 140 bars et des températures de 140 à 320 K résolue avec l'équation	
	de SBK.	26
2.2	Spectre d'énergie : principe de l'approche dynamique. (Figure tirée	
	de Blin, 1999 [7])	32
3.1	Différents sub-stencils utilisés pour le schéma WENO5	36
3.2	Stencils pour le schéma WENO5 bande large à coefficients optimisés.	40
3.3	Partie Réelle et Imaginaire du nombre d'onde modifié pour différents	
	schémas	43

3.4	Schéma de l'évolution temporelle d'un tube à choc après la rupture de la membrane.	45
3.5	Solution à $t = 0.4$ du tube à choc de Sod.	46
3.6	Convection d'une discontinuité de contact avec différents ratios de	
0.0	masse volumique.	48
3.7	A t=1.4 : (a) Profil de masse volumique du problème de Shu-Osher :	
	(b) Agrandissement du profil de masse volumique du problème de	
	Shu-Osher au voisinage des fluctuations post-choc.	49
3.8	Transition du pied du choc. (a) reflexion de Mach inverse, (b) point de	
	transition, (c) Reflexion Régulière Transitionnée. Légende : \mathbf{I} : choc	
	incident, ${\bf S}$: ligne de glissement, ${\bf T}$: point triple, ${\bf H}$: Mach stem, ${\bf R}$:	
	choc réfléchi, $\mathbf{W}:$ choc proche paroi \hdots	50
3.9	Strioscopie numérique des instabilités post-focalisation avec différents	
	schémas numériques : (a) WENO3, (b) WENO5, (c) WENO5-SOL;	
	(d) Comparaison entre le résultat de la simulation avec les effets vis-	
	queux (partie inférieure) et un shadowgraph de l'expérience (partie	
	supérieure). Image de l'expérience extraite de l'article de Skews &	50
9 10	Kleine [93]. \ldots	52
3.10	Contour du nombre de condition des caracteristiques en fonction du	
	[125])	56
	[120])	00
4.1	Schéma du canal simulé	60
4.2	Profil initial de vitesse longitudinale	62
4.3	Profils initiaux de fluctuations moyennes.	63
4.4	Profils initiaux de fluctuations moyennes.	63
4.5	Exemple de courbe d'autocorrélation et échelle intégrale	64
4.6	Profil de corrélations des fluctuations de vitesse longitudinales suivant	
	la direction longitudinale (x). \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	65
4.7	Profil de corrélations des fluctuations de masse volumique suivant la	
	direction transverse (z)	65
4.8	Profil de corrélations des fluctuations de vitesse longitudinales suivant	
1.0	la direction transverse (z)	66
4.9	Profils moyens de vitesse (a), température et masse volumique nor-	
	malisees par leurs valeurs a la paroi. Symboles : DNS Foysi <i>et al.</i> .	67
4 10	Drafta mourana dag álámanta du tangaun da Paunalda (a. k. h.). Sum	07
4.10	Froms moyens des elements du tenseur de Reynolds (a $\&$ b). Sym- boles : DNS Foysi <i>et al.</i> Lignes : DNS	68
/ 11	Scatter plots des fluctuations de température (en haut) et de masse	00
7.11	volumique (en bas) en fonction des fluctuations de vitesse à $u^+ = 11$	
	(a, c) et au centre du canal (b, d). \ldots	69
4.12	Profil moyen de la température totale moyenne $(\langle T_0 \rangle)$ en fonction de	
	la température statique moyenne $(\langle T \rangle)$.	70
4.13	Scatter plots des fluctuations de pression (en haut) et de température	
	(en bas) en fonction des fluctuations de masse volumique à $y^+ = 11$	
	(a,c) et au centre du canal $(b,d).$ $\hfill \ldots$ $\hfill \ldots$ $\hfill \ldots$ $\hfill \ldots$	70
4.14	Champs de la composante normale à la paroi de la vorticité	71

4.15	Isosurfaces de la composante normale à la paroi de la vorticité (négative
	en bleu et positive en rouge).
4.16	Contours de la composante transversale de la vorticité dans un plan
	longitudinal
4.17	Iso-surface du critère Q coloriée par la température
4.18	Evolution temporelle d'une iso-surface du critère Q coloriée par la
	température et d'une coupe de température. Une structure en fer à
	cheval est mise en valeur par un cadre noir afin de mieux suivre son
	évolution temporelle.
4.19	Structure en fer à cheval coloriée par la hauteur en unité de paroi
	(y^+) , par la vitesse longitudinale (b), avec les vecteurs vitesse (c) et
	avec des vecteurs vitesse et des contours de température compris entre
	500 K et 680 K (d).
4.20	Mécanisme de naissance des structures en forme de fer à cheval. (Par-
	tie 1)
4.20	Mécanisme de naissance des structures en forme de fer à cheval. (Par-
	tie 2)
4.21	Structure en demi fer à cheval (encadrée)
4.22	Evolution de Re_{τ} en fonction de la pression (en bar) pour de l'azote
	et de l'hydrogène pour un nombre de Mach constant et un nombre de
	Reynolds constant.
4.23	Evolution de Re_{τ} en fonction du nombre de Reynolds pour de l'azote
	et de l'hydrogène pour un nombre de Mach constant
4.24	Profil de vitesse moyenne normalisée suivant la direction normale à
	la paroi dans les unités proche-paroi.
4.25	Profil du Prandtl turbulent moyen (noir : Prandtl turbulent variable,
	rouge : Prandtl turbulent constant).
4.26	Profil moyens de $\langle \overline{\rho} \rangle \left\langle \widetilde{u'u'} \right\rangle$ pour différents couples de modèles de
	sous-mailles. \ldots
4.27	Profils moyens $\langle \overline{\rho} \rangle \left\langle \widetilde{u'v'} \right\rangle$ pour différents couples de modèles de sous-
	mailles. \ldots $$ \ldots $$ \ldots

Méthode de Cardan pour la résolution des équations cubiques.

La méthode de Cardan a été développée par Jérome Cardan et publiée dans ArsMagna en 1545 pour résoudre les polynômes du troisième degré. Le principe est de ramener via un changement de variable, un polynôme classique du troisième ordre (Eq. (A.1)) au trinôme réduit (Eq. (A.2)).

$$ax^3 + bx^2 + cx + d = 0 (A.1)$$

$$y^3 + my + n = 0 \tag{A.2}$$

Un changement de variable est réalisé en posant $y = x - \frac{b}{3a}$, et les coefficients de la forme réduite s'expriment alors de la façon suivante :

$$m = -\frac{b^2}{3a^2} + \frac{c}{a}$$
$$n = \frac{b}{27a} \left(\frac{2b^2}{a^2} - \frac{9c}{a}\right) + \frac{d}{a}$$

Comme pour les polynômes du deuxième ordre, le choix des solutions se fait grâce au signe d'un discriminant, Δ :.

$$\Delta = n^2 + \frac{4}{27}m^3 . (A.3)$$

On distingue alors trois cas suivant que le discriminant est positif, nul, ou négatif.

• Δ est positif

l'Eq. (A.2) a une solution réelle et deux complexes conjuguées qui s'expriment grâce à ces deux constantes :

$$s_1 = \sqrt[3]{\frac{-n+\sqrt{\Delta}}{2}}$$
 et $s_2 = \sqrt[3]{\frac{-n-\sqrt{\Delta}}{2}}$ (A.4)

La solution réelle est $y_1 = s_1 + s_2$ et les deux complexes sont $y_2 = js_1 + \overline{j}s_2$ et $y_2 = j^2 s_1 + \overline{j^2} s_2$ où $j = e^{2i\pi/3}$.

• Δ est nul

l'Eq. (A.2) a deux solutions réelles :

$$y_1 = \frac{3n}{m}$$
 et $y_2 = \frac{3n}{2m}$ (A.5)

• Δ est négatif

l'Eq. (A.2) a trois solutions réelles :

$$y_k = 2\sqrt{\frac{-m}{3}}\cos\left(\frac{1}{3}\arccos\left(\frac{-n}{2}\sqrt{\frac{27}{-m}}\right) + \frac{2k\pi}{3}\right) \text{ avec } 1 \le k \le 3$$
 (A.6)

Annexe B

Article AIAA Journal : Numerical Simulations of Shock Focusing over Concave Surfaces
Numerical Simulations of Shock Focusing over Concave Surfaces

David Taieb,* Guillaume Ribert,[†] and Abdellah Hadjadj[‡]

Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie, 76801 Saint Etienne du

Rouvray, France

DOI: 10.2514/1.J050199

This paper describes the numerical study of a shock focusing, that is, a planar shock wave impacting a concave surface. Cylindrical and parabolic reflectors are studied for different curvatures, depths and incident Mach numbers. Computations are carried out using a high-order low-dissipation bandwidth-optimized weighted essentially nonoscillatory method and both inviscid and viscous two-dimensional flow models are considered. The obtained results agree well with the experimental observations made by Skews et al. (Skews, B. W., Kleine, H., Barber, T., and Iannuccelli, M., "New Flow Features in a Cavity During Shock Wave Impact," *16th Australian Fluid Mechanics Conference*, Univ. of Queensland, Brisbane, Australia, 2007) and Izumi et al. (Izumi, K., Aso, S., and Nishida, M., "Experimental and Computational Studies Focusing Processes of Shock Waves Reflected from Parabolic Reflectors," *Shock Waves*, Vol. 3, No. 3, 1994, pp. 213–222) for the parabolic one. In the case of cylindrical reflectors, shocks interaction and fine structures as Kelvin–Helmholtz instabilities are recovered, and the computed angles of the transition from an inverse Mach reflection to a transitional regular reflection compare favorably with the analytical model of Ben–Dor (Ben–Dor, G., *Shock Wave Reflection Phenomena*, Springer–Verlag, New York, 1992) for relatively weak incident shock waves ($M_s \leq 2$). In the case of parabolic reflectors, the three types of focalization process are addressed and their own structure analyzed.

Nomenclature

- a = speed of sound
- E_i = internal energy
- $E_k = \text{kinetic energy}$
- $\tilde{E_t}$ = total energy
- h = enthalpy
- h_t = total enthalpy
- M_s = incident shock Mach number
- V_p = piston velocity
- c' = curvature of the parabolic cavity
- L = depth of the parabolic cavity
- X = absciss inside the domain
- Y =ordinate inside the domain
- α_c = critical angle
- V_1 = shock induced flow velocity
- C = compression wave
- F = focusing wave
- H = Mach stem
- I =incident shock
- J = jet
- M = main reflected shock
- R = reflected shock
- S = slipstream
- T = triple point
- V =wall vortex
- W = shock at wall
- γ = heat capacity ratio
- θ = transition angle

[‡]Professor, CNRS UMR 6614, INSA de Rouen, Campus du Madrillet BP12; hadjadj@coria.fr.

Subscripts

0 = state at rest 1 = state postshock

I. Introduction

T HE reflection of a planar shock over a concave surface has attracted the interest of many researchers during the past few years because this type of reflection yields a truly complex and unsteady flow. Consequently, the understanding of this unsteady phenomenon will contribute to the knowledge of more complex process like explosion and blast waves. Basically, the reflection of a shock wave occurs when a planar shock encounters a cylindrical or parabolic concave wall (Fig. 1) and reflects from it forming a locally high-pressure region near the focusing locus. This process may be used to produce very strong shock waves and initiate detonations. The general phenomena of shock focusing in gaseous media were reviewed by Grönig [1] and a comprehensive study of shock focusing was carried out experimentally and numerically by Izumi et al. [2] for a range of parabolic reflectors of different curvatures. Several focusing types were identified with a classification of the shock focusing process according to the incident shock Mach number and reflectors shape. Regarding the dynamics of the shock wave reflection, researchers have focused their studies on the type of transition, from Mach to regular reflection. Depending on the incident Mach number and the cavity shape, direct or inverse Mach reflections can be obtained. Later, when the wedge becomes steep enough, the Mach reflection changes into a transitional regular reflection. The majority of this work, mostly done by Ben-Dor and coworkers, is summarized in his monograph [3]. In a recent article of Skews and Kleine [4], additional information of shock focusing on cylindrical cavities have been provided experimentally. In particular, the very interesting flow patterns generated in the postfocus state are highlighted, showing clearly a jet development and a shear-layer exhibiting a two-dimensional Kelvin-Helmholtz (KH) instability at the early stages of the focusing process[§]. This jet development has been also noticed by Shugaev and Shtemenko [5], Sturtevant and Kulkarny [6] and some figures provided in the articles of Izumi et al. [2] or Liang et al. [7] let also imagine these flow features. Similar trends are observed by Gelfand et al. [8] who studied experimentally the detonation/deflagration processes initiated by semicylinder and

Received 9 September 2009; revision received 2 February 2010; accepted for publication 16 March 2010. Copyright © 2010 by David Taieb, Guillaume Ribert, and Abdellah Hadjadj. Published by the American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., with permission. Copies of this paper may be made for personal or internal use, on condition that the copier pay the \$10.00 per-copy fee to the Copyright Clearance Center, Inc., 222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923; include the code 0001-1452/10 and \$10.00 in correspondence with the CCC.

^{*}Ph.D. Student, CNRS UMR 6614, INSA de Rouen, Campus du Madrillet BP12; taieb@coria.fr.

[†]Associate Professor, CNRS UMR 6614, INSA de Rouen, Campus du Madrillet BP12; ribert@coria.fr. Senior Member AIAA.

[§]Private communication with B. W. Skews, January 2010.

parabolic focusing elements. The two-dimensional roll-up and pairing mechanisms observed for the KH instabilities have been found for weakly compressible shear layers [9,10]. Besides linear stability analysis [11–13] of temporal and spatial stability problems highlighted the two-dimensional nature of the most amplified disturbances up to convective Mach numbers of 0.6. For higher Mach number KH instabilities are inhibited and the flow becomes strongly three-dimensional [14,15]. From numerical point of view, the physical modeling of such complex flows requires an accurate description of both shocks and shear layers. In this context, Liang et al. [7] used a finite volume approach with a second-order total variation diminishing (TVD) scheme of Yee and Harten [16]. They simulated a shock wave ($M_s = 1.2$ or 1.85) impacting a parabolic reflector and compared their results with experimental schlieren pictures. The reflected shock wave observed in these experiments has been well reproduced, however, the associated slipstream instabilities were missed. A similar failure was noted by Skews et al. [17] when they tried to reproduce their experiments using Fluent software with a third-order MUSCL scheme. All these simulations have been realized for two-dimensional configurations as they are focused on the early stages of the focusing process.

In spite of many experimental and numerical studies on the subject, the shock focusing mechanism and its related pressure-peak generation are quite complex. The fundamental knowledge of supersonic flow physics in the presence of shock reflection at concave walls, shock/shock and shock/shear layer interactions is still needed. The objective of the present article is to simulate the shock focusing phenomenon using a high-order low-dissipation shock capturing scheme (weighted essentially nonoscillatory, or WENO, type) in order to bring more light and understanding to the complex phenomenon of shock focusing and transition over concave surfaces. The paper is organized as follow: a brief description of the numerical solver together with the geometrical configurations is given in Sec. II. Cylindrical reflectors are studied in Sec. III for different values of the incident Mach number using both inviscid and viscous computations. Further analysis are performed in Sec. IV for parabolic reflectors with various curvature and depth of the cavity, leading to the conclusion given in Sec. V.

II. Numerical Solver and Flow Configurations

The numerical simulation of the shock focusing was performed by applying the WENO method [18,19] available within an inhouse two-dimensional structured code written in generalized Cartesian coordinates. Even though the WENO method has the great advantage of representing shock waves and other discontinuities very sharply,





there are several disadvantages especially for viscous simulations. As soon as the shock wave propagates and interacts with viscous layers, the mixing front is spread over several mesh points, and strong dumping due to the numerical dissipation are found near contact discontinuities. Compared with the fourth-order Padé scheme, a spectral analysis of the fifth-order WENO scheme exhibits a limited behavior for properly resolving the very fine flow structures. In the present paper, the bandwidth-optimized WENO method proposed by Martín et al. [20], is applied to the shock focusing in air. This method has been already successfully applied to the computation of shockturbulence and shock-mixing interactions [20]. It is a symmetry optimized extension of the fifth-order Shu's WENO method [18,19] referred to us as WENO5-SOL (symmetry-optimized-limiter), which yields a rather steep representation of shocks and discontinuities. The detailed description of the SOL procedure may be found in the original work of Martín et al. [20] and Taylor et al. [21]. Viscous fluxes are computed using a compact fourth-order central scheme [22], whereas time is advanced using an explicit third-order Runge-Kutta TVD approach [19].

A schematic representation of the experimental setup is shown in Fig. 1, where an initial planar shock wave generated by a shock tube impacts the test piece and gives rise to very complex flow structures inside the cavity. Obviously, the strength of the shock as well as the shape of the reflector play an important role in the evolution of different flow features. Numerical computations are presented for two cases, a cylindrical reflector with 64 mm radius and a series of parabolic reflectors having different depths and curvatures. The focusing processes are qualitatively compared with the experiments of Skews and Kleine [4] in the case of cylindrical reflectors. Accordingly, different mesh strategies are adopted depending on the shape of the considered geometry (Fig. 2).

1) For cylindrical reflectors, the mesh contains 1.7 million points. The concavity of the physical domain yields an array of degenerated cells along the bisector to fit the reflector within a topologically equivalent squared computational domain. These cells having a triangular shape (see Fig. 2) are generated with two colinear edges of a squared mesh. Preliminary numerical tests showed that the possible resulting perturbations caused by the nonalignment of the shock with the mesh [23] through this array of cells are negligible. Compared with the experiment apparatus, the gap between the test cavity and the horizontal boundaries of the shock tube (walls in Fig. 1) is removed. Consequently, the inlet lip of the cavity is tangent to the computational domain and the thickness of the lip profile is no longer considered in the simulation. Subsequently, the initial compression waves described by Skews and Kleine [4] are missed in the computation. However, one can argue that the signal emanating from the cavity corner is of limited influence specifically at later stage of flow evolution as it does not much affect the dynamics of the shock reflection and the focusing process as well [4].

2) For the parabolic reflectors, studied experimentally by Izumi et al. [2], the mesh contains 0.85 million points. Unlike cylindrical reflectors, parabolic reflectors are topologically equivalent to a squared box having a small distortion of the cells along the domain. However, the shape of the reflector involves a finite angle at the cavity inlet and small reflected shocks may appear and interact with the upper boundary. The computational domain is then extended further



Fig. 2 Computational domain and mesh strategy for the shock focusing problem.

Table 1Transition angle for different
mesh sizes (in million of cells)

Mesh size	$\theta_{\rm comp} \pm 1^\circ$
1.0	62.66
1.7	60.37
2.4	60.96
Theory	59.24

downstream to avoid shock reflection at the inlet. Note that due to the wall angle, a Mach reflection appears soon contrary to the observation made by Skews et al. [17] in the case of a cylindrical reflector.

Owing to the symmetry of the two configurations, only half of the physical domain is computed, with a symmetry boundary condition imposed at the horizontal centerline. No special treatment is applied near the solid walls. A mesh refinement study has been realized for three different mesh sizes: 1.0, 1.7 and 2.4 million cells. All other things being equal, flow structures have been found quasi unchanged. To assess this behavior, the angle of the invMR \rightarrow TRR transition is computed and compared with the theoretical model proposed by Ben-Dor [3] and developed in the next section. In Table 1, a very good agreement is found from the 1.7 million mesh points. A slip boundary condition is imposed at the cavity wall, except in the case of viscous simulations where the nonslip conditions are fixed along the wall. Supersonic boundary conditions are prescribed at the inlet using Rankine-Hugoniot relations of a moving shock into an ambient air at a given Mach number. The initial conditions are generated using a piston code in a closed box on a mesh equivalent to that of the shock focusing simulation. In this case, the Mach number of the incident shock M_s is related to the piston velocity V_p through the relation [24]

$$(M_s^2 - 1)/M_s = \frac{1}{2}(\gamma + 1)(V_p/a_0)$$
(1)

where a_0 is the speed of sound in the driven gas (fluid at rest).

III. Cylindrical Reflectors

Skews and Kleine's [4] experiments have been considered for the study of cylindrical reflectors. Experimental tests are conducted in a shock tube having a section of 150 mm high and 75 mm wide and a test piece of 64 mm radius and only flow visualizations are currently available. The test-case with an incident shock Mach number of 1.38 is considered hereafter because the flow exhibits nonlinear effects due to the shock propagation, wall interaction and purely viscous postfocus phenomena. As suggested by Skews and Kleine, the description of the flow may be divided into two phases, corresponding to different aspects of the interaction. The first is the reflection of the shock wave at walls and the second corresponds to the focusing process. From a numerical point of view, the early stages of the shock propagation can be described by inviscid computations using standard shock-capturing schemes (second-order TVD, thirdor fifth-order WENO schemes) because the interaction between the incident shock and the emerging boundary-layer is assumed to be very weak. However, at later stages, viscous effects are no longer negligible, in particular when the reflected shock initiates shear layers which quickly evolve in KH instabilities. Accurate solutions of the full Navier-Stokes system are therefore needed.

From an energetic point of view, a moving shock into ambient air separates two energetic states: E_t^0 (gas at rest) and E_t^1 (postshock) with $E_t^1 > E_t^0$. E_t is the total energy, which is the sum of internal (E_i) and kinetic (E_k) energy. Because of the total energy balance, once the incident shock (I) enters the cavity, E_i and E_k increase close to the wall leading to weak compression waves and a curved shock, respectively. Further downstream inside the cavity, the curvature of I increases due to the shape of the wall (Fig. 3a), i.e., the foot of I is moving faster than its center until a sudden transition from regular to inverse Mach reflection (invMR) occurs. Basically, this shock system consists of a Mach stem (H) which correspond to the foot of the incident shock, a reflected shock (R) which is created from a sequence of compression waves, and a slipstream (S), which extends away from the cavity wall (Fig. 3b). R and S are then a consequence of the reflection of the initial shock at the transition, i.e., a release of







a)



Fig. 3 Incident shock wave curvature and invMR \rightarrow TRR transition.



Fig. 4 Focusing process: image courtesy of Skews and Kleine [4].

energy. Another consequence is that *I* is now going faster than *H*. This set of waves are connected through a triple point (*T*) which moves deeper inside the cavity until it collides the reflecting surface (Fig. 3c). At this stage, the Mach stem has disappeared and *T* exhibits a peak of pressure which corresponds to the maximum of E_i and E_k ; note that the maximum of $\nabla h_t = \nabla (h + E_k)$, with *h* the enthalpy of

the system, is located in *R*. The transitional regular reflection (TRR) is then formed until the incident shock hits the bottom of the cavity (Fig. 3d). The nature of the TRR is driven by the pressure peak which detaches *S* and modify the pressure distribution. A new triple point (*T'*) is then created and links together the initial reflected wave *R*, the new reflected wave (*R'*), the wall shock (*W*) and the secondary slipstream (*S'*). This sequence of events has been simulated using three variants of WENO schemes, namely the third-order WENO3, the fifth-order WENO5 and the fifth-order WENO5-SOL schemes with an Euler approach. It is worth noticing that all schemes reproduce the invMR \rightarrow TRR transition as shown in the experiments, with more or less accuracy of the shock thickness.

A. Description of the Shock Focusing Process

According to Skews and Kleine [4], once the focusing process happen, i.e., the incident shock impacts on the cavity giving birth to a focusing wave F, a resulting jet appears inside the cavity by interaction of the secondary slipstream S'. The jet evolves in a mushroom shape with very fine structures at its top. The slipstreams also interact with the near-wall structures leading to a quasi-steady complex vortex. Finally, these shear layers develop KH instabilities (see Fig. 4).

Here again, these flow features have been simulated with the three variants of WENO schemes using inviscid approach and the main trend is recovered. Once the wall reflects the incident shock I, the two





Fig. 6 Numerical schlieren pictures of the focusing process using three numerical schemes.

reflected waves R' merge and form a focusing wave F moving upstream toward the cavity entrance (Fig. 5a). In the meantime the near-wall shocks (W) move toward the symmetry line and a small vortex appears on the base of the sliplines S'. The height of the shock wave F decreases as W evolves, the sliplines being attached to the triple point (Fig. 5b). When the focusing process occurs, the two near-wall shocks collapse into a single reflected shock (M), the sliplines intercept each other (Fig. 5c) and split into two parts. The first separates a low-speed region, which is created when M moves toward the entrance, from a higher speed region (Fig. 5d). Because of this flow configuration, KH instabilities may appear on S'. The second part of S', corresponding to the mushroom legs, remains attached to the triple point (Fig. 5e). In Fig. 5d, as M moves upstream, the hight of the focusing wave increases and bends as well. In Fig. 5e, when the first reflected wave R disappeared, a strong jet (J) develops. As expected, comparison of different numerical schemes (see Figs. 6) reveals the dissipative behavior of WENO3 because the KH instabilities are not well resolved. Nevertheless, the near-wall vortex (V) is relatively well located. Results of WENO5 show an improvement in the description of the mushroom but KH instabilities



Fig. 7 Focusing process, present work: Navier–Stokes computation with WENO5-SOL.

are not yet recovered. Indeed, with WENO5 the near-wall structures are better described but the main vortex V detaches from the sliplines. It is clear that an accurate resolution of these structures requires a precise numerical scheme already observed by Shi et al. [25] for the fifth- and ninth-order WENO numerical schemes. Instabilities are then undoubtedly related to the viscosity introduced by the numerical scheme as already point out by Samtaney and Pullin [26] or Shi et al. [25]. Comparison of an experiment picture and Navier-Stokes results are given in Fig. 7. With Navier–Stokes computations, the interaction of the sliplines is better described, the vortex V is well located and the KH instability is developed when the WENO5-SOL is used. Obviously, at this stage of the focusing process viscous effects are the major ingredients in the description of those phenomena.

B. Effect of the Incident Mach Number on the Focusing Process

Increasing the incident Mach number leads to similar results for both Euler and Navier-Stokes computations. Numerical schlieren pictures presented in Fig. 8 show the focusing process when the mushroom edge detaches from the focusing wave F. Three incident Mach numbers are studied: $M_s = 1.38$, 2, and 5. With the inviscid formulation, the near-wall vortices V are not attached to the sliplines and move deeper into the cavity. For a higher Mach number, nearwall vortices progress faster toward the bottom of the concave region. For the case of $M_s = 2$ (Fig. 8b), these vortices are very close to the symmetry plane and perturb S' as time evolves. For the case of $M_s = 5$ (Fig. 8d), the sliplines are totally destroyed as the vortices from each side of the flow interact. Simulations including viscous effects have been also realized and the corresponding case of $M_s = 2$ is shown in Fig. 8c. Compared with the inviscid case, the main difference is the location of V which stays attached to S'. Near-wall structures are also very different as the reflected shock M interacts with the boundary layer creating small vortices when it moves upstream toward the entrance. The case $M_s = 5$ with viscous terms is not shown here as it exhibits similar behaviors to those of the Euler case. Indeed, increasing M_s leads to increase the Reynolds number, i.e., to reduce the viscous effects. The flow structure is then much more complex. Note that increasing the Mach number leads also to common behaviors: KH instabilities develop on the mushroom legs and the focusing wave is not as curved as in the case $M_s = 1.38$.



Fig. 8 Numerical schlieren pictures of the focusing jet when the mushroom legs detach from the focusing shock.

Table 2 Comparaison of the transition angle

M_s	$\sin(\theta)/\theta$	$\theta_{\rm theo}$	$\theta_{\rm comp} \pm 1^\circ$
1.38	0.831	59.24	60.37
1.8	0.791	66.29	66.68
2	0.784	67.49	69.57
3	0.777	68.64	73.58

Besides, a small jet always faces the bottom of the cavity indicating a stagnation point.

C. Prediction of the invMR \rightarrow TRR Transition

According to Ben-Dor's model [3], an analytical prediction of the invMR \rightarrow TRR transition angle (θ) over cylindrical concave surfaces can be obtained using the following relation:

$$\frac{\sin(\theta)}{\theta} = \frac{M_s}{V_{10} + A_{10}} \tag{2}$$

 $A_{10} = a_1/a_0$ where a_0 and a_1 represent the local speeds of sound ahead and behind the incident shock wave, respectively. $V_{10} =$ V_1/a_0 with V_1 the shock induced flow velocity, and M_s is the incident shock wave Mach number. For a perfect gas, V_{10} and A_{10} are expressed as:

$$V_{10} = \frac{2(M_s^2 - 1)}{(\gamma + 1)M_s} \tag{3}$$

$$A_{10} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \frac{1}{M_s} \left(\frac{2\gamma}{\gamma - 1} M_s^2 - 1 \right)^{1/2} \left(M_s^2 + \frac{2}{\gamma - 1} \right)^{1/2}$$
(4)

with the heat capacity ratio $\gamma = 1.4$. θ (see Fig. 1) is the wedge angle at which the invMR \rightarrow TRR transition occurs. An analysis of Eq. (2) shows that θ increases with the Mach number until $M_s = 2.967$ for which the maximum angle is equal to 68.63 deg. Then θ decreases to an asymptotic value equal to 67.41 degrees. Four different incident shock Mach numbers have been studied: 1.38, 1.8, 2.0 and 3.0. The angles of the invMR \rightarrow TRR transition are reported in Table 2, showing a good agreement between the theoretical model and computations for $M_s \leq 2$.

IV. Parabolic Reflectors

According to the study of Izumi et al. [2], three types of focalization process may occur when a shock wave impacts a parabolic reflector. The two main parameters are the curvature c of



Fig. 9 Focusing phenomenon described with a pressure based numerical schlieren contours for a shallow cavity. $M_s = 2$ and c = 0.75.





Fig. 10 Nondimensional kinetic and internal energies plotted along a given streamline.



Fig. 11 Focusing phenomenon described with a pressure based numerical schlieren contours at $M_s = 2$ and c = 1 for a deep cavity.

reflectors and the incident Mach number M_s . Figure 2b shows the computational domain: parabolic reflectors are defined by their shape, $Y = cX^2$, and depth L. Following Izumi et al. [2], the case $M_s = 2$ and c = 0.75 (Euler) is studied hereafter (see Figs. 9a–9d). When the incident shock wave I penetrates inside the cavity, a reflected shock wave (RSW) appears immediately from each side of the cavity and stays connected to the incident shock (Fig. 9a). In the present case, the cavity is shallow and the two RSW intersect each other when the incident wave is reflected (Fig. 9b). This configuration is denoted type A by Izumi et al. [2] and increasing C

would lead to the type B configuration, which occurs when the RSW only intersect after the focusing of waves. Type C is defined when the RSW interact before and after the focusing point. The structure of the flow contained between the RSW and the test-piece may be analyzed by plotting E_k and E_i on an instantaneous streamtrace (see Fig. 9b). Results are shown in Fig. 10a and reveal a compression wave (*C*) and a slipline (*S*) for any type A configuration. Indeed, *C* and *S* are created as soon as *I* impacts the parabolic reflector but are barely visible in classical numerical schlieren visualizations due to strong numerical or acoustic perturbations (Figs. 9a–9d). They are both



Fig. 12 Focusing phenomenon described with a pressure based numerical schlieren contours at $M_s = 2$ and c = 1 for a very deep cavity.

linked to the RSW and move toward the axis of symmetry. Close to the focusing point, the compression waves from each side of the parabola meet (Fig. 9c) and give birth to a small Mach stem (H) (see Fig. 9d). In the meantime, S are detached from RSW and a triple point is created linking H, RSW, RSW' which is the branch of RSW curved by the Mach stem development and S' which is the new slipline.

According to Izumi et al. [2], increasing the curvature from c = 0.75 to c = 1 with $M_s = 2$ will change the topology of the flow from a type A to a type B situation. Numerous simulations have been realized and none of them exhibit such a behavior. Nevertheless, type B is recovered when the depth L of the cavity has increased (Figs. 11a–11d) and type C appears when L is much more large (Figs. 12a–12d). For both types, when the incident wave hits the cavity, a single Mach reflection (SMR) appears immediately. Thus, increasing L and keeping constant c and M_s changes the topology of the flow because the angle of attack α (see Fig. 2b) becomes sharper. As a consequence a critical angle α_c depending on c and M_s should exist and separate two distinct phenomena: a compression wave moving lower than the incident shock wave (type B and C).

In the type B configuration (Figs. 11a-11d), the Mach stem H firstly increases as the incident shock progresses into the cavity. E_k and E_i are plotted on a streamtrace again. Figure 10b show the presence of the Mach stem and the slipline. Note that compared with the type A, the jump of E_k is much more high in the case of a SMR. Approaching the bottom of the cavity H decreases and some KH instabilities appears on the slipline S. Near the bottom of the cavity a transition occurs very quickly as the incident shock reflects immediately. The nature of this transition needs a more accurate simulation but these first results tend to show a new SMR structure with a slipline S' attached to S. The incident wave is then reflected but quickly disappears as the two RSW meet each others. At this waves focalization the Mach stems H' of the second SMR structure give birth to a reflected shock and a jet having the shape of a mushroom as in the cylindrical case. Going further into the simulation, the RSW cross once again before being totally separated by the main reflected shock M. In the meantime, the jet evolves facing the entrance of the cavity.

In the type C configuration (Figs. 12a–12d), the length of the cavity is deeper than previously. The curvature and the incident Mach number do not change: c = 1 and $M_s = 2$. When *I* enters into the cavity, the simulations exhibit a SMR structure as in the previous case. However the two RSW have enough time to meet each other before the cavity reflects completely *I* (Fig. 12a). Before this reflection the 2 M stems *H* meet and a new triple point is created with a new slipline *S'* and forwarding shock *I'* (see Fig. 12b). Approaching the bottom of the cavity, RSW is first reflected by the wall RSW', immediately followed by *I'* (Fig. 12c). A main reflected wave *M* appears and a jet is created in the continuity (Fig. 12d).

V. Conclusions

In this study, Euler and Navier-Stokes computations have been performed to simulate the focusing process of a two dimensional shock wave. High-order low-dissipative shock capturing methods are used to describe accurately both shocks and contact discontinuities and also to assess the performance of different variants of WENO schemes. Overall, accurate results are obtained using the bandwidth-optimized WENO (Martin et al. [20]) scheme with the limiter proposed by Taylor et al. [21]. The results are qualitatively in good agreement with the experiment of Skews and Kleine [4] in the case of cylindrical reflectors. Furthermore, the computed angles of the invMR \rightarrow TRR transition compare favorably with the analytical model of Ben-Dor et al. [3] within the limit of weak shock waves $(M_s \leq 2)$. In the case of parabolic reflectors, not only the incident Mach number and curvature of the test piece, but also the depth of the cavity, is required to switch from a flow structure to another one. For a shallow cavity, this structure exhibits a compression wave and a slipstream whereas a single Mach reflection appears for a deeper cavity, i.e., with a sharper angle of attack, other things being equal. For the deepest cavities, a KH instability and a jet facing the entrance

of the cavity is found similarly to the study of cylindrical cavities. However the nature of these flow structures should be analyzed with more accuracy. Nevertheless, most of the features observed in the experiment are accurately reproduced by the simulations. In general, the results of this study provide a better understanding of the main characteristics of complex shock focusing phenomena that are not easily accessible experimentally, and may be useful for flow controlling and practical shock/obstacle interaction or blast waves design and improvement.

Acknowledgments

This research is supported by the French Aerospace Industry (Snecma-Moteurs/Centre National d'Etudes Spatiales), and the Regional Council of Upper Normandy (Région Haute-Normandie).

References

- Grönig, H., "Shock Wave Focusing Phenomena," Proceedings of the 15th International Symposium on Shock Tubes and Waves, Stanford Univ. Press, Berkeley, CA, 1986.
- [2] Izumi, K., Aso, S., and Nishida, M., "Experimental and Computational Studies Focusing Processes of Shock Waves Reflected from Parabolic Reflectors," *Shock Waves*, Vol. 3, No. 3, 1994, pp. 213–222. doi:10.1007/BF01414715
- [3] Ben-Dor, G., Shock Wave Reflection Phenomena, Springer-Verlag, New York, 1992.
- [4] Skews, B. W., and Kleine, H., "Flow Features Resulting from Shock Wave Impact on a Cylindrical Cavity," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 580, 2007, pp. 481–493. doi:10.1017/S0022112007005757
- [5] Shugaev, F., and Shtemenko, L., Propagation and Reflection of Shock Waves, World Scientific, Hackensack, NJ, 1998.
- [6] Sturtevant, B., and Kulkarny, V., "The Focusing of Weak Shock Waves," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 73, No. 4, 1976, pp. 651– 671.

doi:10.1017/S0022112076001559

- [7] Liang, S., Wu, L., and Hsu, R., "Numerical Investigation of Axisymetric Shock Wave Focusing over Paraboloidal Reflectors," *Shock Waves*, Vol. 9, No. 6, 1999, pp. 367–379. doi:10.1007/s001930050167
- [8] Gelfand, B., Khomik, S., Bartenev, A., Medvedev, S., Gronig, H., and Olivier, H., "Detonation and Deflagration Initiation at the Focusing of Shock Waves in Combustible Gaseous Mixture," *Shock Waves*, Vol. 10, No. 3, 2000, pp. 197–204. doi:10.1007/s001930050007
- [9] Clemens, N., and Mungal, M., "Two- and Three-Dimensional Effects in the Supersonic Mixing Layer," *AIAA Journal*, Vol. 30, No. 4, 1992, pp. 973–981. doi:10.2514/3.11016
- [10] Lele, S. K., "Compressibility Effects on Turbulence," Annual Review of Fluid Mechanics, Vol. 26, No. 1, 1994, pp. 211–254. doi:10.1146/annurev.fl.26.010194.001235
- [11] Ragab, A., and Wu, J., "Linear Instabilities in Two Dimensional Compressible Mixing Layers," *Physics of Fluids*, Vol. A, No. 6, 1989, pp. 957–966.
- [12] Zhuang, M., Kubota, T., and Dimotakis, P., "Instability of Inviscid, Compressible Fee Shear Layers," *Physics of Fluids*, Vol. 28, No. 10, 1991, pp. 1728–1733.
- [13] Sandham, N. D., and Reynolds, W., "Compressible Mixing Layer: Linear Theory and Direct Simulation," *AIAA Journal*, Vol. 28, 1990, pp. 618–624. doi:10.2514/3.10437
- [14] Clemens, N., and Mungal, M., "Large-Scale Structure and Entrainment in the Supersonic Mixing Layer," *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 284, No. -1, 1995, pp. 171–216. doi:10.1017/S0022112095000310
- [15] Lesieur, M., Metais, O., and Comte, P., Large-Eddy Simulations of Turbulence, Cambridge Univ. Press, Cambridge, England, 2005.
- [16] Yee, H., and Harten, A., "Implicit TVD Schemes for Hyperbolic Conservation Laws in Curvilinear Coordinates," *AIAA Journal*, Vol. 25, No. 2, 1987, pp. 266–274. doi:10.2514/3.9617
- [17] Skews, B. W., Kleine, H., Barber, T., and Iannuccelli, M., "New Flow Features in a Cavity During Shock Wave Impact," *16th Australian Fluid Mechanics Conference*, Univ. of Queensland, Brisbane, Australia, 2007.

[18] Jiang, G. S., and Shu, C. W., "Efficient Implementation of Weighted Eno Schemes," *Journal of Computational Physics*, Vol. 126, 1996, pp. 202–228.

doi:10.1006/jcph.1996.0130

- [19] Shu, C. W., and Osher, S., "Efficient implementation of essentially nonoscillatory shock-capturing schemes ii," *Journal of Computational Physics*, Vol. 83, No. 1, 1989, pp. 32–78. doi:10.1016/0021-9991(89)90222-2
- [20] Martín, M. P., Taylor, E. M., Wu, M., and Weirs, V. G., "A Bandwidth-Hyph-Optimized WENO Scheme for Effective Direct Numerical Simulation of Compressible Turbulence," *Journal of Computational Physics*, Vol. 220, No. 1, 2006, pp. 270–289. doi:10.1016/j.jcp.2006.05.009
- [21] Taylor, E. M., Wu, M., and Martín, M. P., "Optimization of Nonlinear Error for Weighted Essentially Non-Oscillatory Methods in Direct Numerical Simulations of Compressible Turbulence," *Journal of Computational Physics*, Vol. 223, No. 1, 2007, pp. 384–397. doi:10.1016/j.jcp.2006.09.010
- [22] Kudryavtsev, A. N., and Khotyanovsky, D. V., "A Numerical Method for Simulation of Unsteady Phenomena in High Speed Shear Flows," *International Conference on the Methods of Aerophysical Research* 98,

International Conference on the Methods of Aerophysical Research, Novosibirsk, Russia, 1998.

- [23] Sanders, R., Morano, E., and Druguet, M. C., "Multidimensional Dissipation for Upwind Schemes: Stability and Applications to Gas Dynamics," *Journal of Computational Physics*, Vol. 145, No. 2, 1998, pp. 511–537.
 - doi:10.1006/jcph.1998.6047
- [24] Emanuel, G., *Gasdynamics: Theory and Applications*, AIAA, New York, 1986.
- [25] Shi, J., Zhang, Y.-T., and Shu, C.-W., "Resolution of High Order WENO Schemes for Complicated Flow Structures," *Journal of Computational Physics*, Vol. 186, No. 2, 2003, pp. 690–696. doi:10.1016/S0021-9991(03)00094-9
- [26] Samtaney, R., and Pullin, D. I., "On Initial-Value and Self-Similar Solutions of the Compressible Euler Equations," *Physics of Fluids*, Vol. 8, No. 10, 1996, pp. 2650–2655. doi:10.1063/1.869050

C. Bailly Associate Editor

Annexe C

Méthode de Klein pour la génération de conditions initiales

La méthode nécessite la connaissance au préalable du tenseur des contraintes de Reynolds, $R_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$. Celui-ci peut être déterminé soit expérimentalement, soit via des lois empiriques ou analytiques.

Une fois ce tenseur connu, une décomposition de Cholesky (décomposition d'une matrice définie positive - de valeurs propres non nulles positives - en un produit d'une matrice triangulaire inférieure avec sa transposée : $R = AA^T$) lui est appliquée. La matrice résultat de cette opération s'écrit de la façon suivante :

$$(A_{ij}) = \begin{pmatrix} (R_{11})^{1/2} & 0 & 0 \\ R_{21}/A_{11} & (R_{22} - A_{21}^2)^{1/2} & 0 \\ R_{31}/A_{11} & (R_{32} - A_{12}A_{31})/A_{22} & (R_{31} - A_{31}^2 - A_{32}^2)^{1/2} \end{pmatrix}$$
(C.1)

La méthode nécessite un générateur de nombre pseudo-aléatoire, r_i , tel que celui proposé par James [43]. A noter qu'un coefficient multiplicateur doit être appliqué aux valeurs issues du générateur afin de satisfaire les propriétés statistiques nécessaires à l'algorithme de Klein ($\overline{r_i r_j} = \delta_{ij}$ et $\overline{r_i} = 0$).

Dans l'article original de Klein [50], la méthode est détaillée pour générer une perturbation pour une condition aux limites d'entrée. Dans le cadre de la simulation de Foysi *et al.*, elle a été légèrement modifiée pour construire une solution initiale perturbée par une pseudo-turbulence. Ici l'avancement en temps a été remplacé par un avancement de plan du domaine.

Ainsi, les différentes étapes de la méthode de Klein se résument à :

- Etape 1 : fixer pour chaque direction α les longueurs caractéristiques L_{α} et en déduire le nombre de maille caractéristique du filtre n_{α} :

$$L_x = n_x \Delta x, \ L_y = n_y \Delta y, \ L_z = n_z \Delta z \tag{C.2}$$

– Etape 2 : choisir la taille des filtres M_{α} en respectant :

$$M_{\alpha} \ge 2n_{\alpha} \text{ avec } \alpha = x, y, z$$
 (C.3)

- Etape 3 : créer et stocker un vecteur \mathcal{R}_{α} de valeur aléatoire de dimension $[-M_x: M_x, -M_y + 1: M_y + N_y, -M_z + 1: M_z + N_z]$ pour les trois directions α de l'espace et N_y , N_z sont les nombres de mailles du plan considéré.
- Etape 4 : calculer les coefficients b_{ijk} tels que :

$$b_{ijk} = b_i b_j b_k \text{ avec } b_k = \tilde{b_k} / (\sum_{l=-M_\alpha}^{M_\alpha} b_l) \text{ et } \tilde{b_l} = exp(-\frac{\pi l^2}{2n_\alpha^2})$$
(C.4)

– Etape 5 : appliquer l'opération de filtrage pour j
= $1 \rightarrow N_y$ et k= $1 \rightarrow N_z$

$$\Psi_{\alpha}(j,k) = \sum_{i'=-M_x}^{M_x} \sum_{j'=-M_y}^{M_y} \sum_{k'=-M_z}^{M_z} b_{i'j'k'} \mathcal{R}_{\alpha}(i',j+j',k+k')$$
(C.5)

– Etape 6 : calculer le profil perturbé :

$$u_{\alpha} = \overline{u_{\alpha}} + A_{\alpha\beta}\Psi_{\beta}(j,k) \tag{C.6}$$

– Etape 7 : décaler le champ de valeurs aléatoires :

$$\mathcal{R}_{\alpha}(i,j,k) = \mathcal{R}_{\alpha}(i+1,j,k) \tag{C.7}$$

- Etape 8 : recalculer un plan de valeur aléatoire : $\mathcal{R}_{\alpha}(M_x,j,k)$
- Etape 9 : répéter les étapes de 5 à 8 sur l'ensemble des plans (yz) du canal.

Bibliographie

- G. ACCARY, I. RASPO, P. BONTOUX, AND B. ZAPPOLI, Three-dimensional rayleigh-bénard instability in a supercritical fluid., C.R. Mecanique, 332 (2004), pp. 209–216.
- [2] N. ADAMS AND K. SHARIFF, A high-resolution hybrid compact-ENO scheme for shock-turbulence interaction problems, J. Comput. Phys., 127 (1996), pp. 27–51.
- [3] S. AMIROUDINE, P. BONTOUX, P.AND LARROUDÉ, B. GILLY, AND B. ZAP-POLI, Direct numerical simulation of instabilities in a two-dimensional nearcritical fluid layer heated from below, J. Fluid Mech., 442 (2001), pp. 119–140.
- [4] J. BARDINA, J. FERZIGER, AND W. REYNOLDS, Improved subgrid scale models for large eddy simulation, AIAA Paper, 80 (1980), p. 1357.
- [5] —, Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows. Report TF-19, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Standford University, 1983.
- [6] G. BEN-DOR, Shock wave reflection phenomena. Springer-Verlag New-York, 1992.
- [7] L. BLIN, Modélisation statistique et simulation des grandes échelles des écoulements turbulents application aux inverseurs de poussée, PhD thesis, université de Rouen, 1999.
- [8] J. BORIS, F. GRINSTEIN, E. ORAN, AND R. KOLBE, New insights into Large Eddy Simulation, Fluid Dynamics Research, 10 (1992), pp. 199–227.
- [9] H. BOUKARI, J. SHAUMEYER, M. BRIGGS, AND G. R.W., *Critical speeding* up in pure fluids, Phys. Rev. A, 41 (1990), pp. 2260–2263.
- [10] P. BRADSHAW, Compressible turbulent shear layers, Ann. Rev. Fluid Mech., 9 (1977), pp. 33–54.
- [11] C. BRUN, M. BOIARCIUC, M. HABERKORN, AND P. COMTE, Large eddy simulation of compressible channel flow, Theor. Comput. Fluid Dyn., 22 (2008), pp. 189–212.
- [12] P. BUELOW, Convergence enhancement of Euler and Navier-Stokes Algorithms, PhD thesis, The Pennsylvania State University, 1995.
- [13] P. BUELOW, S. VENKATASWARAN, AND C. MERKEL, *Effect of grid aspect ratio on convergence*, AIAA Journal, 32 (1995), pp. 2401–2408.
- [14] J. CARDAN. Ars Magna, 1545.

- [15] J. CARLILE AND R. QUENTMEYER, An experimental investigation of highaspect-ratio cooling passages, AIAA Paper 92-3154 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit, (1992).
- [16] T. CEBECI AND A. SMITH, Analysis of turbulent boundary layers. New York : Academic.
- [17] A. CESSOU, O. WERQUIN, AND D. STEPOWSKI, Alteration of the irradiance field when performing laser diagnostics in a corrugated liquid or supercritical jet, September 2001.
- [18] P. CHASSAING, *Turbulence en mécanique des fluides*, Cépaduès-Editions, 2000.
- [19] J. CHEN, E. HAWKES, R. SANKARAN, S. MASON, AND H. IM, Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities. I. Fundamental analysis and diagnostics, Combust. Flame, 145 (2006), pp. 128–144.
- [20] Y. CHOI AND C. MERKLE, The application of preconditionning in viscous flows, J. Comput. Phys., 105 (1993), pp. 207–223.
- [21] G. N. COLEMAN, J. KIM, AND R. R. MOSER, A numerical study of turbulent supersonic isothermal-wall channel flow, J. Fluid Mech., 305 (1995), pp. 159– 183.
- [22] R. COURANT, K. FRIEDRICHS, AND H. LEWY, On the partial difference equations of mathematical physics, IBM Journal, (March 1967), pp. 215–234.
- [23] Y. DUBIEF AND F. DELCAYRE, On coherent-vortex identification in turbulence., Journal of Turbulence, 1 (2000), pp. 1–22.
- [24] S. DUBOS, Simulation des grandes échelles d'écoulements turbulents supersoniques, PhD thesis, INSA de Rouen, France, 2005.
- [25] E. ELSEN, P. LEGRESLEY, AND E. DARVE, Large calculation of the flow over a hypersonic vehicle using gpu, J. Comput. Phys., 227 (2008), pp. 10148–10161.
- [26] G. ERLEBACHER, M. SPEZIALE, C. HUSSAINI, AND T. ZANG, Toward the large eddy simulation of compressible turbulent flows, ICASE Report 90-76, (1990).
- [27] H. FERNHOLZ AND P. FINLEY, A complication of compressible turbulent boundary layer data, AGARD-AG, 223 (1977).
- [28] —, A critical commentary on mean flow data for two-dimensional compressible turbulent boundary layers, AGARD-AG, 253 (1980).
- [29] H. FOYSI, S. SARKAR, AND R. FRIEDRICH, Compressibility effects and turbulence scalings in supersonic flow, J. Fluid Mech., 509 (2004), pp. 207–216.
- [30] Y. GARRABOS, M. BONETTI, D. BEYSENS, F. PERROT, T. FRÖLICH, P. CARLÈS, AND B. ZAPPOLI, Relaxation of a supercritical fluid after a heat pulse in the absence of gravity effects : Theory and experiments., Phys. Rev. E, 57 (1998), pp. 5665–5681.
- [31] T. GATSKI AND C. SPEZIALE, On explicit algebraic stress models for complex turbulent flows, J. Fluid Mech., 254 (1993), pp. 59–78.
- [32] J. GAVIGLIO, Reynolds analogies and experimental study of heat transfer in supersonic boundary layer, Int. J. Heat Mass Transfer, 30 (1987), pp. 911–26.

- [33] M. GERMANO, U. PIOMELLI, P. MOIN, AND W. CABOT, A dynamic subgridscale eddy viscosity model, Phys. of Fluids, 7 (1991), pp. 1760–1765.
- [34] S. GHOSAL, Mathematical and physical constraints on LES, AIAA Journal, (1999).
- [35] D. GOTTLIEB AND S. ORSZAG, Numerical analysis of spectral methods, Society for industrial and applied mathematics, (1977).
- [36] M. GRABOSKI AND T. DAUBERT, A modified Soave equation of state for phase equilibrium calculation, 1. Hydrocarbon systems, Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 17 (1978), pp. 443–448.
- [37] —, A modified Soave equation of state for phase equilibrium calculation,
 2. Systems containing CO₂, H₂S, N₂, and CO, Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development, 17 (1978), pp. 449–454.
- [38] S. GUARINI, R. MOSER, K. SHARIFF, AND A. WRAY, Direct numerical simulation of a supersonic turbulent boundary layer at mach 2.5, J. Fluid Mech., 414 (2000), pp. 1–33.
- [39] E. HAWKES, J. SANKARAN, SUTHERLAND, AND J. CHEN, Scalar mixing in direct numerical simulations of temporally evolving plane flames with skeletal CO/H kinetics, Proc. Combust. Inst., 31 (2007), pp. 1633–1640.
- [40] E. HAWKES, R. SANKARAN, AND J. CHEN, Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities. II. Parametric Study, Combust. Flame, 145 (2006), pp. 145–159.
- [41] P. HUANG AND G. COLEMAN, Van driest transformation and compressible wall-bounded channel flows : DNS results and modelling, J. Fluid Mech., 305 (1995), pp. 185–218.
- [42] P. HUANG, G. COLEMAN, AND P. BRADSHAW, Turbulence statistics in fully developed channel flow at low reynolds number, J. Fluid Mech., 177 (1995), pp. 133–166.
- [43] J. JAMES, A review of pseudorandom number generator, Comput. Phys. Comm., 60 (1990), pp. 329–344.
- [44] G. JIANG AND C. SHU, Efficient implementation of Weighted ENO schemes., J. Comput. Phys., 126 (1996), pp. 202–228.
- [45] J. JIMENEZ AND P. MOIN, The minimal flow unit in near-wall turbulence, J. Fluid Mech., 225 (1991), pp. 213–240.
- [46] J. JIMENEZ, P. MOIN, R. MOSER, AND L. KEEFE, Ejection mechanisms in sublayer of turbulent channel, Phys. of Fluids, 6 (1988).
- [47] W. JONES AND B. LAUNDER, The prediction of laminarization with twoequation model of turbulence, Int. J. of Heat and Fluid Transfer, 15 (1972), pp. 301–314.
- [48] E. R. JR, S. SURESH, AND M. DONOHUE, A simple equation of state for nonspherical and associating molecules, Industrial and Engineering Chemistry : Research, 29 (1990), pp. 1476–1485.
- [49] H. JUNG, C. MERKEL, R. SCHUFF, AND A. W.E., Detailed flowfield prediction of heat transfer to supercritical fluids in high aspect ratio channels, AIAA Paper 2007-5549 43rd Joint Propulsion Conference and Exhibit, (2007).

- [50] M. KLEIN, A. SADIKI, AND J. JANICKA, A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations, J. Comput. Phys., 186 (2003), pp. 652–665.
- [51] O. KNAB, T. FRÖLICH, D. WENNERBERG, AND W. HASLINGER, Advanced cooling circuit layout for the vinci expander cycle thrust chamber, AIAA Paper 2002-4005 38th Joint Propulsion Conference and Exhibit, (2002).
- [52] A. KUDRYAVTSEV AND D. KHOTYANOVSKY, A numerical method for simulation of unsteady phenomena in high speed shear flows, in ICMAR'98 Int. Conf. on Methods of Aerophysical Research, 1998.
- [53] B. LAUNDER, G. REECE, AND W. RODI, Progress in the development of a Reynolds stress turbulence closure, J. Fluid Mech, 68 (1975), pp. 557–66.
- [54] B. LAUNDER AND B. SHARMA, Application of the energy dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc, Letters in Heat and Mass Transfer, 1 (1974), pp. 131–138.
- [55] H. LAURENT, Turbulence d'une intéraction onde de choc/couche limite sur une paroi adiabatique ou chauffée., PhD thesis, Université Aix-Marseille, France, 1996.
- [56] R. LECHNER, J. SESTERHENN, AND R. FRIEDRICH, *Turbulent supersonic* channel flow, Journal of Turbulence, 2 (2001).
- [57] S. LELE, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, J. Comput. Phys., 103 (1992), pp. 16–42.
- [58] E. LENORMAND, P. SAGAUT, AND L. TA PUHOC, Large eddy simulation of subsonic and supersonic channel flow at moderate reynolds number, Int. J. Numer. Meth. Fluids., 32 (2000), pp. 369–406.
- [59] A. LEONARD, Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows, Adv. Geophys., (1974).
- [60] X. LI, K. HASHIMOTO, Y. TOMINAGA, M. TANAHASHI, AND T. MIYAU-CHI, Numerical stuy of heat transfer mechanism in turbulent supercritical CO₂ channel flow, J. Therm. Sci. and Tech., 3 (2007), pp. 112–123.
- [61] D. LIGNELL, J. CHEN, AND P. SMITH, Three dimensional direct numerical simulation of soot formation and transport in a temporally evolving nonpremixed ethylene jet flame, Combust. Flame, 155 (2008), pp. 316–333.
- [62] D. LILLY, A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method, Phys. of Fluids, 3 (1991), pp. 633–635.
- [63] X. D. LIU, S. OSHER, AND T. CHAN, Weighted essentially non-oscillatory schemes., J. Comput. Phys., 115 (1994), pp. 200–212.
- [64] D. LOCKHARD, K. BRENTNER, AND H. ATKINS, High -accuracy algorithms for computational aeroacoustics, AIAA Journal, 32(2) (1995), pp. 246–251.
- [65] M. P. MARTIN, E. M. TAYLOR, M. WU, AND V. G. WEIRS, A bandwidthoptimized WENO scheme for effective direct numerical simulation of compressible turbulence, J. Comput. Phys., 220 (2006), pp. 270–289.
- [66] H. MENG AND V. YANG, A unified treatment of general fluid thermodynamics and its application to a preconditionning scheme, J. Comput. Phys., 189 (2003), pp. 277–304.

- [67] F. MENTER, Zonal two-equation k- ω turbulence models for aerodynamic flows, 1993.
- [68] —, Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications, AIAA Journal, 32 (1994), pp. 269–289.
- [69] Y. MIZOBUCHI, S. TACHIBANA, J. SHINIO, S. OGAWA, AND T. TAKENO, A numerical analysis of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame, Proc. Combust. Inst., 29 (2002), pp. 2009–2015.
- [70] P. MOIN, K. SQUIRES, W. CABOT, AND S. LEE, A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, Phys. of Fluids, 11 (1991), pp. 2746–2757.
- [71] A. MONIN AND A. YAGLOM, Statistical Fluid Mechanics : Mechanics of Turbulence, vol. 2, Dover Publications, Inc, 1975.
- [72] Y. MORINISHI, S. TAMANO, AND K. NAKABAYASHI, Direct numerical simulation of compressible turbulent channel flow between adiabatic and isothermal walls, J. Fluid Mech., 502 (2004), pp. 273–308.
- [73] M. MORKOVIN, Effects of compressibility on turbulent flows. Ed. A. Favre (London : Gordon and Breach), 1962.
- [74] A. MOURONVAL, Etude numérique des phénomènes aéroélastiques en aérodynamique supersonique. Application aux tuyères propulsives., PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, France., 2004.
- [75] D. PENG AND D. ROBINSON, A new two-constant equation of state, Industrial and Engineering Chemistry : Fundamentals, 15 (1976), pp. 59–64.
- [76] K. PITZER, D. LIPPMAN, R. CURL, C. HUGGINS, AND D. PETERSEN, The volumetric and thermodynamic properties of fluids. II. Compressibility factor, Vapor Pressure and Entropy of Vaporization, Journal of the American Chemical Society, 77-13 (1955).
- [77] D. PONZIANI, S. PIROZZOLI, AND F. GRASSO, Development of optimized weighted-ENO schemes for multiscale compressible flows, Int. J. for Numer. Meth. Fluids, 42 (2003), pp. 953–977.
- [78] S. POPE, A more general effective viscosity hypothesis, J. Fluid Mech., 72 (1975), pp. 331–40.
- [79] —, *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 1990.
- [80] K. QUERING, W. ZEISS, D. WIEDMANN, O. KNAB, Y. TORRES, AND D. SU-SLOV, Numerical and experimental studies of heat transfer in asymmetrically heated cooling channels. 3rd european conference for aerospace science (EU-CASS), 2009.
- [81] M. RAI AND S. CHAKRAVARTHY, Conservative high order accurate finite difference methods for curvilinear grids, AIAA paper-93-3380, (1993).
- [82] O. REDLICH AND J. KWONG, On the thermodynamics of solutions. v. an equation of state. fugacities of gaseous solutions, Chem. Rev., 44(2) (1949), p. 233.
- [83] M. J. RINGUETTE, M. WU, AND M. P. MARTIN, Coherent structures in DNS of turbulent boundary layers at mach 3, J. Fluid Mech., 594 (2008), pp. 59–69.

- [84] W. RODI, A new algebraic relation for calculating the Reynolds stress, ZAMM, 56 (1976), pp. 219–21.
- [85] D. ROSSINELLI, M. BERGDORF, G. COTTET, AND P. KOUMOUTSAKOS, Gpu accelerated simulations of bluff body flows using vortex particle methods, J. Comput. Phys., 229 (2010), pp. 3316–3333.
- [86] S. ROUX, Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustion., PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [87] M. RUBESIN, Extra compressibility terms for favre-averaged two-equation models of inhomogeneous turbulent flows. NASA CR-177556, 1990.
- [88] P. SAGAUT AND T. B., Subgrid-scale model improvements for nonhomogeneous flows, First AFOSR International Conference on DNS and LES, (1997).
- [89] L. SELLE, N. OKONG'O, J. BELLAN, AND K. HARSTAD, Modelling of subgridscale phenomena in supercritical transitional mixing layers : an a priori study, J. Fluid Mech., 593 (2007), pp. 57–91.
- [90] C. SHU, Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. Advanced Numerical Approximation of Non-Linear Hyperbolic Equations, 1998.
- [91] C. SHU AND S. OSHER, Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes., J. Comput. Phys., 83 (1989), pp. 32–78.
- [92] J. SHUEN, K. CHEN, AND Y. CHOI, A coupled implicit method for chemical non equilibrium flows at all speeds, J. Comput. Phys., 106 (1993), pp. 306–318.
- [93] B. W. SKEWS AND H. KLEINE, Flow features resulting from shock wave impact on a cylindrical cavity, J. Fluid Mech., 580 (2007), pp. 481–493.
- [94] J. SMAGORINSKY, General circulation experiments with primitive equations, Mon. Weather Rev., 61 (1963), pp. 99–164.
- [95] A. SMITS AND J. DUSSAUGE, *Turbulent shear layers in supersonic flow*, American Institute of Physics, (1996).
- [96] G. SOAVE, Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state, Chem. Eng. Sci., 27 (1972), p. 1197.
- [97] G. SOD, A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys., 27 (1978), pp. 1–31.
- [98] P. SPALART, W. JOU, M. STRETLETS, AND S. ALLMARAS, Comments on the feasibility of LES for wings and on the hybrid RANS/LES approach, Advances in DNS/LES, Proceedings of the first AFOSR International Conference on DNS/LES, (1997).
- [99] E. SPINA, A. SMITS, AND S. ROBINSON, The physics of supersonic turbulent boundary layers, Ann. Rev. Fluid Mech., 26 (1994), pp. 287–319.
- [100] M. STRETLETS, Detached eddy simulation of massively separated flows, AIAA Paper, 2001-0879, (2001).
- [101] D. SUSLOV, J. WOSCHNAK, J. SENDER, AND M. OSCHWALD, Test specimen design and measurement technique for investigation of heat transfer processes

in cooling channels of rocket engines under real thermal conditions. 39th Joint Propul. Conf. (Alabama), AIAA 2003-4613, 2003.

- [102] L. TA PHOC, Modèles de sous-maille appliquées aux écoulements instationnaires décollés, DGA/DRET, journée thématique DRET : aérodynamique instationnaire turbulente - aspects numériques et expérimentaux, (1994).
- [103] D. TAIEB, G. RIBERT, AND A. HADJADJ, Numerical simulations of shock focusing over concave surfaces., AIAA Journal, 48 (2010), pp. 1739–1747.
- [104] C. TAM AND J. WEBB, Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational aeroacoustics, J. Comput. Phys., 107 (1993), pp. 262–281.
- [105] E. M. TAYLOR, M. WU, AND M. P. MARTIN, Optimization of nonlinear error for weighted essentially non-oscillatory methods in direct numerical simulations of compressible turbulence., J. Comput. Phys., 223 (2007), pp. 384–397.
- [106] Y. TORRES, Heat and mass transfer in curvatures of cooling channels of rocket engine, PhD thesis, Université de Valenciennes, 2008.
- [107] Y. TORRES, D. SUSLOV, AND O. HAIDN, Nitrogen two-phases in regenerative cooling channels of rocket engine. 3rd european conference for aerospace science (EUCASS), 2009.
- [108] J. VAN DER WAALS, On the continuity of the gaseous and liquid states, PhD thesis, Université de Leiden, 1872.
- [109] E. VAN DRIEST, Turbulent boundary layer in compressible fluids, J. Aero. Sci., 18 (1951), pp. 145–160.
- [110] M. VAN DYKE, An Album of Fluid Motion, the parabolic press, 1982.
- [111] I. VELOUDIS, Z. YANG, J. MCGUIRK, AND G. PAGE, Assement of digital filter approach for generating large eddy simulation inlet conditions, Proceeding ETMM 6, (2005), pp. 307–371.
- [112] I. VELOUDIS, Z. YANG, J. MCGUIRK, G. PAGE, AND A. SPENCER, Novel implementation and assessment of a digital filter based approach for the generation of les inlet conditions, Flow Turbulence Combustion, 79 (2007), pp. 1–24.
- [113] S. VENKATESWARAN AND C. MERKEL, Dual time stepping and preconditionning for unsteady computations, AIAA Paper 95-0078, (1995).
- [114] B. VREMAN, B. GEURTS, AND H. KUERTEN, A priori tests of large eddy simulation of compressible plane mixing layer, J. Eng. Math., 29 (1995), pp. 299– 327.
- [115] —, Subgrid modeling in LES of compressible flow, Appl. Scient. Research, 54 (1995), pp. 191–203.
- [116] V. WEIRS, A numerical method fo direct simulation of compressible turbulence, PhD thesis, University of Minnesota, December 1998.
- [117] F. WHITE, Viscous fluid flow, McGraw-Hill, Inc, 1991.
- [118] D. WILCOX, Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models, AIAA Journal, 26 (1988), pp. 1414–1421.
- [119] —, Turbulence modeling for CFD, 2nd Ed., DCW Industries, Inc., 2004.

- [120] V. YAKHOT, S. ORSZAG, S. THANGAM, T. GATSKI, AND C. SPEZIALE, Development of turbulence models for shear layer flows by a double expansion technique, Phys. of Fluids, 4 (1992), pp. 1510–1520.
- [121] V. YANG, Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems, Proc. Combust. Inst., 28 (2000), pp. 925–942.
- [122] A. YOSHIZAWA, Statistical theory for compressible turbulent shear flows with the application to subgrid modeling, Phys. of Fluids, 7 (1986), pp. 2152–2164.
- [123] B. ZAPPOLI, D. BAILLY, Y. GARRABOS, B. LE NEINDRE, P. GUENOUN, AND D. BEYSENS, Anomalous heat transport by piston effect in supercritical fluids under zero gravity, Phys. Rev. A, 41 (1990), pp. 2224–2267.
- [124] H. ZHANG, R. SO, C. SPEZIALE, AND Y. LAI, Near-wall two-equation model for compressible turbulent flows, AIAA Journal, 31 (1993), pp. 196–199.
- [125] N. ZONG, Modeling and simulation of cryogenic fluid injection and mixing dynamics under supercritical conditions., PhD thesis, The Pennsylvania State University, 2005.
- [126] N. ZONG AND V. YANG, Cryogenic fluid jet and mixing layers in transcritical and supercritical environments, Combust. Sci. Tech., 178 (2006), pp. 193–227.
- [127] —, An efficient preconditionning scheme for real-fluid mixture using primitive pressure-temperature variables, Int. J. Comput. Fluid. Dyn., 21 (2007), pp. 217–230.
- [128] —, Near-field and flame dynamics of LOX/methane shear coaxial injector under supercritical conditions, Proc. Combust. Inst., 31 (2007), pp. 2309–2317.