HAL
open science

Contribution à la simulation numérique d'écoulements turbulents compressibles canoniques

Radouan Boukharfane

To cite this version:

Radouan Boukharfane. Contribution à la simulation numérique d'écoulements turbulents compressibles canoniques. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechique - Poitiers, 2018. Français. NNT : 2018ESMA0003 . tel-01878795

HAL Id: tel-01878795

https://theses.hal.science/tel-01878795v1

Submitted on 21 Sep 2018

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

Pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE

DE MÉCANIQUE ET D'AÉROTECHNIQUE

(Diplôme national — Arrêté du 25 mai 2016)

École doctorale :

Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique

Secteur de recherche :

Énergétique, Thermique, Combustion

Présentée par :

Radouan BOUKHARFANE

****

Contribution à la simulation numérique d'écoulements turbulents compressibles canoniques

****

Directeur de thèse : **Arnaud Mura**

Co-encadrant : **Zakaria Bouali**

****

Soutenue le 04 juillet 2018

devant la commission d'examen

****

Jury

Président :

M.	Serge Simoëns	Directeur de recherche CNRS–LMFA

Rapporteurs :

M.	Serge Simoëns	Directeur de recherche CNRS–LMFA
M.	Abdellah Hadjadj	Professeur INSA ROUEN–CORIA

Membres du jury :

Mme.	Françoise Bataille	Professeur UPVD–PROMES
M.	Michel Gonzalez	Chargé de recherche CNRS–CORIA
M.	Stéphane Jamme	Professeur associé ISAE–SUPAERO
M.	Zakaria Bouali	Maître de conférences ENSMA–PPRIME
M.	Arnaud Mura	Directeur de recherche CNRS–PPRIME

The purpose of education is not to make a machine, but to make the human being.

انقر بيضة وجودك بمنقار صدقك.

À la mémoire de ma grande mère Zohra, je dédie cette thèse.

Remerciements

D'abord, je remercie la région Poitou-Charentes qui a financé cette thèse dans le cadre d'une bourse régionale. J'adresse mes remerciements ensuite à MM. Yves Gervais, Jacques Borée et Arnaud Mura de m'avoir accueilli dans le département Fluides, Thermique, Combustion de l'Institut Pprime.

Je souhaite exprimer ma profonde gratitude à mon directeur de thèse Arnaud Mura, sans qui, cet accouchement douloureux n'aurait jamais eu lieu. Je n'oublierai jamais son soutien et sa disponibilité dans les moments de doute. Je lui suis reconnaissant pour tous les moments de partage qui ont agrémenté mon parcours de thésard. Je remercie aussi Zakaria Bouali pour l'encadrement de ce travail de thèse. Merci pour l'autonomie qu'il a su m'accorder.

Je tiens à remercier MM. Serge Simoëns et Abdellah Hadjadj pour avoir accepté la tâche peu gratifiante de rapporter ce travail et pour leur remarques qui m'ont grandement aidé à améliorer la qualité du manuscrit (et parfois même la compréhension) de ce travail, le tout avec une clarté exemplaire. C'est avec joie que je les remercie pour l'intérêt qu'il ont porté à mes travaux ainsi que pour leurs remarques encourageantes et constructives. Je suis très honoré que Mme. Françoise Bataille, MM. Michel Gonzales et Stéphane Jamme aient accepté de faire partie de mon jury, malgré un mois de juillet épouvantable du point de vue des conférences...

Je souhaite remercier le personnel de l'ENSMA pour son accueil chaleureux. À cet égard, je tiens à exprimer ma reconnaissance à Jocelyne, Marie-Cannelle, Audrey, Céline, Corinne, pour les efforts qu'elles réalisent afin d'offrir les meilleures conditions pour les thésards.

Ma gratitude s'adresse aussi à ceux qui ont été tour à tour mes collègues de bureau, Luis, Nguyen, Xiadong, Fabio, Marcos et Song (le post-doc le plus serviable et marrant du monde). Tout d'abord pour leur accueil, mais surtout pour les nombreuses discussions que nous avons eues sur tout et rien. J'exprime aussi mes remerciements, et sans ordre de préférence, à tous les doctorants (anciens et actuels) de l'institut P' : Lahna (que je félicite chaleureusement pour

son mariage), Said, Maxime, Goeffry, Paul, David, Carlos, Romain, Stéphane, Clément, Ayoub, Younes, Ahmed, ..., qui ont participé à la bonne humeur de l'institut. Merci à tous pour les excellents moments partagés. Il y a aussi mes amis et anciens camarades que la distance géographique n'a pas découragé pour suivre l'évolution de ma thèse. J'ai une pensée pour (1) Habib, Zerrad, Abdellatif, Mourad, Imane, Ibtissam et Nisrine au Maroc, (2) Prasamit (frère de cœur), Anass, Hamza, Amine, Rida, Maryam, Saima au Canada, (3) Idriss (mon éternel binôme) en Autriche, (4) Othmane en Chine, (5) Ramzi (la bonté personnifiée) en Arabie-Saoudite.

Pour finir cette liste d'amis qui m'ont surtout supporté tout au long de cette thèse et m'ont beaucoup aidé pour recharger les batteries presque tous les jours, j'ai gardé les meilleurs pour la fin : Anthony, Omar et Aimad. Anthony pour les heures interminables qu'on a passées ensemble au labo et les échanges scientifiques et philosophiques sans fin. Omar pour être toujours là avec son sourire et sa générosité et son noble caractère. Et Aimad, que je ne saurais comment remercier lui et sa femme Sonia. Il était là pour m'aider depuis le tout début de cette thèse et n'a jamais épargné le moindre effort pour me remonter le moral et m'aider tout au long de mon parcours doctoral. Je te souhaite, Aimad, plein succès dans ta future carrière et beaucoup de bonheur dans ton couple.

Ma reconnaissance va à ceux qui ont plus particulièrement assuré le soutien affectif pendant ma thèse : ma mère Khadija, mon père Ali, mon grand frère Said (et sa femme Fatima) et mes deux sœurs Fatiha et Nezha, merci pour votre irremplaçable et inconditionnel soutien. Je tiens à remercier tout particulièrement mes parents pour leur soutien quotidien indéfectible et leur enthousiasme contagieux à l'égard de mes travaux comme de la vie en général. Ils sont mon moteur, ma source de motivation, ils n'ont jamais cessé de me soutenir, me supporter, m'encourager. Je n'aurais pas assez de mots pour vous remercier et vous dire ce que vous représentez pour moi. Vous m'avez toujours encouragé à aller de l'avant malgré la difficulté d'être loin de ses proches. Merci d'avoir été là pour écarter les doutes, soigner les blessures et partager les joies. Cette thèse est aussi la vôtre. j'ai également une pensée toute particulière pour ma grand-mère Zohra décédée il y a maintenant dix ans. Que Dieu ait pitié de son âme.

Mes derniers remerciements et non les moindres, s'adressent à ma femme Meryem qui, pour mon plus grand bonheur, partage ma vie et mes expériences professionnelles depuis leurs origines. Elle m'a inlassablement encouragé pour bien finir ma thèse. Son soutien a été sans faille et je lui serai éternellement reconnaissant d'avoir été la pierre angulaire de ce projet.

Bon, comme je commence à écrire plus de remerciements que de science, je vais simplement terminer en remerciant tous ceux qui m'ont rendu la vie agréable ces dernières années.

le 19 juillet 2018
Radouan Boukharfane

Table des matières

Nomenclature **ix**

1 Introduction **1**

1.1 Contexte industriel 1

1.2 Contexte de recherche 2

1.3 Objectifs de la thèse 3

1.4 Organisation du manuscrit 5

2 Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs **7**

2.1 Hypothèses et cadre du travail 8

2.2 Équations de conservation de l'aérothermochimie 8

2.3 Propriétés thermochimiques des mélanges 9

2.3.1 Variables thermochimiques 9

2.3.2 Équation d'état 10

2.3.3 Énergie totale, énergie interne, enthalpie et chaleurs spécifiques 10

2.4 Cinétique chimique et taux de réaction 12

2.5 Propriétés du transport détaillé 15

2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses 15

2.5.2 Flux de masse surfacique 16

2.5.3 Flux de chaleur surfacique 17

2.5.4 Calcul des coefficients du transport détaillé 17

2.6 Lois simplifiées de transport 18

3 Présentation et prise en main de CREAMS 21

3.1 Outils numériques 22

3.1.1 Discrétisation spatiale des flux convectifs 22

3.1.2 Discrétisation spatiale des flux diffusifs 26

3.1.3 Intégration temporelle 27

3.1.4 Critères de stabilité numérique 29

3.1.5 Température du mélange 29

3.2 Conditions aux limites non-réfléchissantes et absorbantes 30

3.2.1 Conditions aux limites non-réfléchissantes 30

3.2.2 Conditions aux limites absorbantes 34

3.2.3 Relations de Rankine-Hugoniot 34

3.3 Cas tests numériques 37

3.3.1 Problèmes de Riemann bidimensionnels 37

3.3.2 Tube à choc inerte multi-espèces 37

3.3.3 Flamme laminaire pré-mélangée d'hydrogène et oxygène 39

3.3.4 Transport d'un vortex 40

3.3.5 Interaction choc-tourbillon 42

4 Étude bibliographique des méthodes de frontières immergées 45

4.1 Position du problème 45

4.2 Forçage continu 47

4.2.1 Méthode de Peskin 48

4.2.2 Méthode de Pénalisation 50

4.3 Forçage discret 51

4.3.1 Méthode de "maille fantôme" 51

4.3.2 Méthode de "maille coupée" 53

4.4 Avantages et inconvénients de chaque classe d'IBM 54

5 Méthode de frontières immergées mise au point 57

5.1 Mise en oeuvre numérique de la méthode 58

5.1.1 Description surfacique d'une frontière immergée 58

5.1.2 Identification des points "fluide" et "solide" 58

5.1.3 Description de la méthode PVM 61

5.1.4 Description de la méthode GPM 64

5.1.5 Procédure du couplage 68

5.2 Validation de la méthode IBM développée 68

5.2.1 Plaque plane subsonique 69

5.2.2 Écoulements autour d'un cylindre 71

5.2.2.1 Écoulements subsonique autour d'un cylindre à faible nombre de Reynolds 72

5.2.2.2 Écoulements supersonique autour d'un cylindre à grand nombre de Reynolds 76

5.2.2.3 Évaluation de la conservation globale de la masse 82

5.2.3 Interaction d'un obstacle avec une onde de choc issue d'une explosion à l'air libre 83

5.2.3.1 Diffraction d'une onde de choc sur un obstacle 83

5.2.3.2 Réflexion des ondes de choc (interférences RR-MR) 86

5.2.4 Marche montante 88

5.2.5 Écoulement subsonique autour d'une sphère 90

5.2.6 Écoulement supersonique autour d'une sphère 90

5.2.7 Écoulement supersonique autour d'un projectile 91

6 Initialisation et paramètres de la simulation DNS 93

6.1 Turbulence homogène isotrope 94

6.1.1 Échelles spatiales et temporelles de la turbulence 95

6.1.2 Facteurs d'aplatissement et de dissymétrie 97

6.2 État de l'art des travaux antérieurs 97

6.3 Génération des conditions initiales de turbulence 99

6.3.1 Première Approche 100

6.3.2 Deuxième Approche 101

6.3.3 Choix du spectre initial de turbulence 103

6.3.4 Comparaison de différentes conditions initiales 104

6.4 Aspects numériques de la simulation directe 108

6.4.1 Conditions initiales 108

6.4.2 Condition en entrée 109

6.4.3 Condition de sortie 112

6.4.4 Paramètres de la simulation 113

7 Résultats de la simulation numérique directe pour l'interaction choc-turbulence 117

7.1 Vérification de la simulation numérique directe 118

7.2 Énergie cinétique turbulente 125

7.3 Évaluation de l'enstrophie 130

7.3.1 Bilan de vorticité 132

7.3.2 Interaction entre vorticité et déformation 132

7.3.3 Angle entre enstrophie et déformation 138

7.3.4 Production d'enstrophie 139

7.4 Structure locale de la turbulence 140

7.5 Évolution des échelles de longueur 144

8 Interaction choc-scalaire passif 147

8.1 Description des configurations étudiées 147

8.2 Phénoménologie du mélange scalaire passif en présence de choc 148

8.3 Gradient instantané du scalaire et dissipation scalaire 149

8.3.1 Champ scalaire : mélange turbulent 154

8.3.2 Interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire 157

8.4 Similitudes entre le vecteur de vorticité et le gradient scalaire 164

8.5 Effets des statistiques de λ_2 sur le champ scalaire 166

8.6 Intermittence du champ scalaire 167

9 Impact de la viscosité volumique sur une couche de mélange impactée par choc 169

9.1 Notion de viscosité volumique 169

9.2 Propriétés générales des couches de mélange 172

9.3 Caractéristiques du mélange étudié 174

9.4 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas bidimensionnel . . . 176

9.4.1 Cas inerte 178

9.4.2 Cas réactif 181

9.5 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas tridimensionnel . . . 189

9.5.1 Comparaison qualitative 189

9.5.2 Comparaison quantitative 190

10 Conclusions et perspectives 203

Annexes 208

A Réactions particulières pour le calcul du taux de réaction 209

A.1 Effet du troisième corps 209

A.2 Effet de Fall-Off 210

B Coefficients de transport multi-espèces 211

B.1 Viscosité volumique 211

B.2 Viscosité de cisaillement 211

B.3 Coefficient de diffusion 212

B.4 Conductivité thermique partielle 212

C Intégration des termes réactifs 213

D Traitement des coins à angle droit 217

E Formalisme de la théorie de l'analyse d'interaction linéaire 221

F Génération du champ scalaire fluctuant 227

Bibliographie 231

Nomenclature

Dans un soucis de concision, nous ne reportons ici que les notations utilisées de façon continue dans le manuscrit (les autres seront présentées au fur et à mesure de leur utilisation).

Acronymes

`CFD`	*(Computational Fluid Dynamics)* Dynamique des fluides numérique
`CFL`	Courant-Friedrichs-Levy
`CPU`	*(Central Processing Unit)* Unité centrale de traitement
`CREAMS`	*Compressible REActive Multi-Species*
`DNS`	*(Direct Numerical Simulation)* Simulation numérique directe
`DTHI`	Dégénérescence de Turbulence Homogène Isotrope
`IBM`	*Immersed Boundary Method*
`GPM`	*Ghost-Point Method*
`LIA`	*(Linear Interaction Theory)* Analyse Linéaire de l'Interaction choc-turbulence
`MPI`	*Message Passing Interface*
`NSCBC`	*Navier–Stokes Characteristic Boundary Conditions*
`PDF`	*(Probability Density Function)* Fonction densité de probabilité
`PVM`	*Physical Virtual Model*
`RANS`	*Reynolds Average Navier–Stokes Simulation*
`RMS`	*(Root Mean Square)* Écart-type
`RDT`	*(Rapid Distrotion Theory)* Théorie de la Distortion Rapide
`RSM`	*Reynolds Stress Models*
`SDR`	*(Scalar Dissipation Rate)* Taux de dissipation scalaire
`THI`	Turbulence Homogène et Isotrope
`TSI`	*Turbulence-Scalar-Interaction*
`W(ENO)`	*(Weighted) Essentially Non-Oscillatory*

Nombres adimensionnels

Fo	Nombre de Fourier (chaleur transférée / chaleur stockée)
Le	Nombre de Lewis (diffusion thermique / diffusion de masse)
M	Nombre de Mach (vitesse / célérité du son)
Pr	Nombre de Prandtl (viscosité moléculaire / diffusion thermique)
Re	Nombre de Reynolds (inertie / viscosité)
Sc	Nombre de Schmidt (viscosité moléculaire / diffusion de masse)

Opérateurs

$\widehat{f}$	Transformée de Fourier
$\overline{f}$	Moyenne au sens de Reynolds
$\widetilde{f}$	Moyenne au sens de Favre

Indices

$(.)_1$	Désigne une variable en amont du choc
$(.)_2$	Désigne une variable en aval du choc

Exposants

$(.)^*$	Grandeur adimensionnée
$(.)'$	Fluctuation au sens de Reynolds
$(.)''$	Fluctuation au sens de Favre
$(.)^C$	Partie compressible de la variable considérée
$(.)^S$	Partie solénoïdale de la variable considérée
$(.)^t$	Transposée

Symbole Définition(s)

Lettres romaines

e_t	Énergie totale massique
h	Enthalpie massique
k	Nombre d'onde
$\mathcal{K}$	Énergie cinétique turbulente
$\mathcal{L}_t$	Échelle intégrale d'espace
$\mathcal{N}_{\text{sp}}$	Nombre d'espèces dans le mélange
P	Pression
Q	Critère Q, second invariant du gradient de vitesse
$\mathcal{S}$	Coefficient de dissymétrie
S_{ij}	Tenseur des taux de déformation
S_ξ	Taux de ségrégation de la fraction de mélange ξ
$\mathcal{T}$	Coefficient d'aplatissement
t	Temps
u_i	Composante de la vitesse suivant la i^{e} direction
x_i	Coordonnée cartésienne suivant la i^{e} direction
Y_α	Fraction massique de l'espèce α
$\mathscr{W}$	Tenseur antisymétrique du tenseur du gradient de vitesse
$\mathcal{Z}$	Scalaire passif

Lettres grecques

γ	Rapport des capacités calorifiques du mélange
Δt	Pas de discrétisation temporelle
Δx_i	Pas de discrétisation spatiale dans la i^{e} direction
ε	Taux de dissipation de la turbulence *(Turbulent dissipation rate)*
κ	Viscosité volumique *(bulk viscosity)*
μ	Viscosité dynamique
ν	Viscosité cinématique
ξ	Scalaire passif normalisé
ρ	Masse volumique
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
τ_K	Échelle temporelle de Kolmogorov
τ_λ	Échelle temporelle de Taylor
ω_i	Vorticité du champs de vitesse dans la i^{e} direction
$\dot{\omega}$	Taux de dégagement de chaleur
δ	Épaisseur de vorticité
η_K	Échelle spatiale de Kolmogorov
λ	Échelle spatiale de Taylor

1 Introduction

Mini-sommaire

1.1 Contexte industriel 1
1.2 Contexte de recherche 2
1.3 Objectifs de la thèse 3
1.4 Organisation du manuscrit 5

1.1 Contexte industriel

L'année 2017 a marqué le soixante-dixième anniversaire du premier vol brisant le mur du son à bord d'un curieux petit avion, le *Bell* X-1, doté d'un moteur-fusée le 14 octobre 1947. Cet événement a marqué un jalon dans l'industrie aéronautique et fourni un domaine riche et fertile pour les physiciens, numériciens et mathématiciens. En effet, à partir de cette date, une course technologique effrénée s'est lancée pour mettre en place des engins spatiaux de plus en plus rapides et efficaces. Parmi eux se trouvent les super-statoréacteurs à combustion supersonique (*scramjet*) qui font actuellement partie des moteurs aérobies les plus prometteurs pour la propulsion des véhicules rapides du futur.

Le comburant, l'air extérieur, est admis par une entrée d'air placée à l'avant du véhicule. Il est ensuite ralenti et comprimé géométriquement, sans pièces tournantes, ce qui explique l'emploi du nom statoréacteur utilisé pour désigner ce type de moteur intégralement basé sur un fonctionnement statique, le statoréacteur. Le combustible est injecté en entrée de la chambre de combustion, où il se mélange et brûle avec l'air. La combustion a lieu en régime supersonique et génère des gaz chauds qui traversent une tuyère et sont accélérés par une détente (Figure 1.1). L'effet propulsif est créé par la différence entre les quantités de mouvement sortante et entrante.

Pour deux raisons principales, la chambre de combustion est l'élément critique lors de la conception d'un *scramjet*. La première est que son processus doit assurer une stabilité

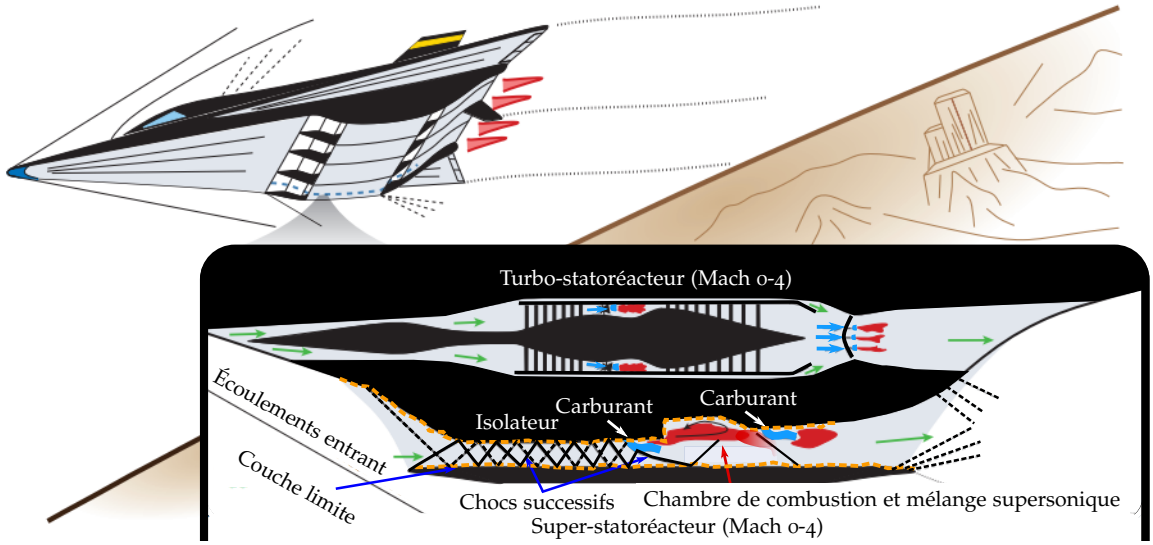


Figure 1.1. *Schéma de principe d'un super-statoréacteur. Inspiré de [264].*

efficace dans toutes les conditions de vol. En effet, compte tenu des vitesses d'écoulements, qui varient entre 1000 et 3000 m/s, le temps disponible pour l'injection du combustible, la création du mélange réactif comburant-carburant l'auto-inflammation du carburant, et la combustion est très court. L'élaboration de nouvelles technologies assurant la mise au point du processus de combustion afin d'atteindre une haute efficacité du moteur constitue un enjeu de tout premier plan. La deuxième raison est que la chambre de combustion est la composante subissant les plus grandes charges thermiques et mécaniques. En effet, les pièces mécaniques doivent supporter de très fortes températures et cela nécessite l'emploi de matériaux spécifiques. Les différents systèmes propulsifs proposés comme solution pour pallier ces difficultés mettent en jeu des phénomènes physiques très complexes : interactions de chocs, interaction choc/turbulence, géométries complexes, couches de mélange fortement compressibles, jets supersoniques, organisations tridimensionnelles complexes s'organisant autour d'enroulements tourbillonnaires, etc.

1.2 Contexte de recherche

L'élaboration de stratégies de calcul des écoulements régnant dans ces moteurs est un point crucial dans de nombreux domaines d'application d'aérothermodynamique, en particulier, les simulations numériques sont de plus en plus intégrées dans le processus de conception en complément voire même en remplacement de certains essais expérimentaux. Ce progrès, incité par le développement rapide des ressources informatiques et l'augmentation continue de la puissance des supercalculateurs, a permis de stimuler les chercheurs à proposer un bon nombre de modèles mathématiques et de méthodes numériques pour la simulation numérique des écoulements réactifs turbulents. En revanche, les simulations de chambre de combustion souffrent encore d'un grand nombre de limitations :

- La résolution spatiale très limitée quand il s'agit de simuler des écoulements tridimensionnels sur des configurations géométriques complexes en prenant en compte toutes les échelles spatio-temporelles caractéristiques ;
- La compréhension et la modélisation des instabilités aérodynamiques dues aux interactions onde de choc-couche limite, choc-couche cisaillée turbulente ou choc-choc, d'autant plus que ces chocs sont inhérents aux systèmes supersoniques. En outre, l'efficacité du mélange (non-réactif et réactif) doit indéniablement coexister avec ces chocs. La complexité des phénomène mis en jeu limite encore la précision des simulations numériques ;
- La modélisation de la turbulence, de la cinétique chimique et de leur interaction est encore un point très délicat. En particulier, les modèles de combustion utilisés dans les simulations numériques de l'interaction choc-flamme, des phénomènes d'inflammation ou de la formation de polluants combinent des cinétiques chimiques complexes avec des phénomènes de transport détaillés. Une bonne maîtrise des effets associés à la description des propriétés moléculaires (transport et cinétique) est d'un intérêt primordial.

Ce travail de thèse s'inscrit dans la continuité des travaux déjà réalisées au sein de l'équipe de recherche "Structures de Flammes et Combustion Turbulente" de l'Institut Pprime. Parmi les objectifs généraux de cette activité de recherche, on mentionnera :

- la compréhension et la modélisation des effets mutuels de compressibilité et de dégagement de chaleur sur le mélange turbulent ;
- l'identification des couplages aéroacoustiques apparaissant en situation d'interaction choc-turbulence-combustion ;
- la détermination des processus de mélange multi-espèces et d'allumage en écoulements supersoniques ;
- l'amélioration des modèles de turbulence pour ces régimes compressibles.

Ce projet de thèse se positionne en particulier sur la problématique d'amélioration de compréhension des écoulements compressibles dans des configurations canoniques et représentatives.

1.3 Objectifs de la thèse

La diversité des phénomènes rencontrés dans les domaines du transport aéronautique et aérospatial constitue un vaste champ d'étude dont on se propose d'appréhender et d'approfondir quelques uns des aspects. Ce travail de thèse s'inscrit donc dans une préoccupation forte des concepteurs de moteurs aérospatiaux de type super-statoréacteurs. L'étude proposée comporte trois parties cohérentes mais distinctes.

Le premier volet de la recherche est de vocation numérique et consiste en le développement d'une technique numérique permettant la prise en compte d'une certaine forme de complexité géométrique. Cette partie est inhérente au domaine de la CFD en général. En effet, dans un

contexte industriel, la simulation numérique en mécanique des fluides consiste à reproduire l'écoulement en présence d'un corps dont les propriétés physiques au niveau des parois sont définies. L'objectif est de restituer au mieux les grandeurs pariétales, telle que la pression, nécessaires à l'élaboration et au dimensionnement de cet objet. Réaliser un calcul sur un maillage précis, tenant compte de l'ensemble des irrégularités de ces objets peut être prohibitif, en particulier si l'objet est en mouvement. Cela est d'autant plus important que la simulation instationnaire des écoulements au sein d'une chambre de combustion nécessite le recours à des schémas numériques précis. Il s'agit ici de contribuer à l'ensemble des méthodes dites de Domaines Fictives dans lesquelles l'objet est plongé dans un unique maillage englobant les milieux fluide et solide. L'originalité a concerné principalement la mise en œuvre d'une nouvelle variante de la méthode numérique de type "méthode de frontières immergées". Cette méthode permet de réaliser sur maillage cartésien des simulations en géométrie arbitraire à moindre coût CPU et taille mémoire. L'attrait principal de cette méthode est sa capacité à traiter l'écoulement d'un fluide compressible ou incompressible autour d'obstacles en régime laminaire ou turbulent. Les performances de la méthode développée sont validées à partir d'un éventail assez large de "benchmarks" bien documentés dans la littérature.

Le deuxième volet de cette thèse concerne l'étude de situations idéalisées d'interaction choc-turbulence au moyen de simulations numériques directes. Il a pour principal objectif de mettre en lumière l'ensemble des mécanismes physiques fondamentaux mis en jeu lors d'interaction entre une turbulence homogène isotrope libre et une onde de choc droite. Une attention particulière est accordée à la génération de champs turbulents homogènes et isotropes et à la manière de les injecter dans le domaine de calcul. Différents calculs sont réalisés, permettant d'améliorer notre compréhension des évolutions observées pour les principales grandeurs statistiques au cours de l'interaction avec le choc. Cette partie de thèse est complétée par une étude d'interaction choc-mélange scalaire pour étudier l'impact du choc normal sur le processus de mélange. L'étude réalisée constitue un point de départ possible pour l'étude de configurations plus complexes telles que l'interaction choc-couche limite turbulente, choc-couche de mélange voire même l'interaction détonation-turbulence.

Le troisième volet de cette thèse s'intéresse aux propriétés de transport, et en particulier celles de la viscosité volumique. En effet, l'approximation de Stokes est couramment retenue pour la modélisation des fluides compressibles. Cette hypothèse consiste à négliger la viscosité volumique κ en supposant que le rapport κ/η est petit devant l'unité, η désignant la viscosité de cisaillement. Néanmoins, la théorie cinétique et les mesures expérimentales indiquent que ce rapport κ/η est toujours d'ordre unité—voire plus grand—pour les gaz polyatomiques, qui sont les gaz les plus courants. Nous nous sommes donc intéressés à l'impact de la viscosité volumique dans la configuration d'une couche de mélange. Les simulations numériques confirment que la viscosité volumique a une influence non-négligeable sur le développement instationnaire de l'écoulement considéré.

1.4 Organisation du manuscrit

Ce mémoire est constitué de 10 chapitres et de 5 annexes. Il est organisé comme suit :

§2«Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs» ce chapitre rappelle les équations gouvernant les fluides compressibles, visqueux, réactifs ainsi que les différentes hypothèses et approximations utilisées.

§3«Présentation et prise en main de CREAMS» ce chapitre est consacré à la présentation des outils numériques utilisés. Cela comprend les schémas numériques de discrétisation spatiale et temporelle et les conditions limites. Il se conclut avec quelques cas tests de validation.

§4«Étude bibliographique de méthodes des frontières immergées» ce chapitre est dédié à dresser un bref état de l'art des différentes méthodes de frontières immergées.

§5«Méthode de frontières immergées mise au point» ce chapitre présente la méthode de frontières immergées développée dans le cadre de cette thèse qui est basée sur la combinaison de deux approches "*Direct-Forcing*" et "*Ghost-Point-Forcing*". En particulier, les éléments clés pour l'intégration de cette méthode seront exposés. Différents calculs sont présentés pour valider la technique proposée.

§6«Initialisation et paramètres de la simulation DNS» ce chapitre présente une synthèse bibliographiques des principaux travaux consacrés au problème d'interaction entre une onde de choc plane et une turbulence homogène isotrope. Il s'en suit la présentation des paramètres de la simulation numérique directe tels que retenus pour générer la base de données pour cette configuration.

§7«Résultats de la simulation numérique directe pour l'interaction choc-turbulence» ce chapitre regroupe les résultats obtenus par la DNS pour le problème d'interaction choc-THI. On détaillera l'impact du choc sur les fluctuations turbulentes et les processus analysés et, en particulier, on mettra l'accent sur l'effet de l'intensité de choc sur chaque paramètre étudié.

§8«Interaction choc-scalaire passif» ce chapitre complète l'analyse conduite dans le chapitre précédent en s'intéressant à l'effet du choc sur les propriétés du mélange. L'accent sera mis sur l'effet du choc sur les propriétés du gradient du scalaire en écoulement turbulent ainsi que sur d'autres paramètres caractéristiques du mélange scalaire.

§9«Impact de la viscosité volumique sur une couche de mélange impactée par choc» ce chapitre est consacré à l'étude de l'effet de la viscosité de volume κ sur le développement spatial de couches de mélange compressibles bidimensionnelles et tridimensionnelles impactées par choc oblique.

2

Équations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Mini-sommaire

2.1 Hypothèses et cadre du travail **8**
2.2 Équations de conservation de l'aérothermochimie **8**
2.3 Propriétés thermochimiques des mélanges **9**
2.3.1 Variables thermochimiques 9
2.3.2 Équation d'état 10
2.3.3 Énergie totale, énergie interne, enthalpie et chaleurs spécifiques . . . 10
2.4 Cinétique chimique et taux de réaction **12**
2.5 Propriétés du transport détaillé **15**
2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses 15
2.5.2 Flux de masse surfacique 16
2.5.3 Flux de chaleur surfacique 17
2.5.4 Calcul des coefficients du transport détaillé 17
2.6 Lois simplifiées de transport **18**

Les équations de bilan locales pour la masse, la quantité de mouvement, l'énergie et les fractions massiques des espèces pour des mélanges gazeux compressibles et réactifs sont rappelées dans ce chapitre. Elles fournissent l'ensemble des quantités nécessaires au mécanicien des fluides pour reproduire de façon intégrale les phénomènes observés par la voie de résolution analytique ou par simulation numérique. Ces équations sont établies sur la base d'hypothèses et de postulats, souvent anciens, que nous rappellerons brièvement sans discuter leur bien fondé. Elles sont complétées par des lois de comportement et d'autres modélisations concernant la thermodynamique, le transport moléculaire et la cinétique réactionnelle qui seront également rappelées. En outre, nous introduisons les définitions et notations spécifiques à ce contexte.

2.1 Hypothèses et cadre du travail

Le cadre de ce travail repose sur des propriétés de mécanique des milieux continus. Ce formalisme implique que le nombre de Knudsen, $\mathcal{K}_n$, défini comme le rapport entre le libre parcours moyen et une dimension caractéristique de l'écoulement reste suffisamment faible devant l'unité. Cette condition assure qu'une particule fluide du système considéré est assez grande pour contenir un échantillon suffisant de molécules, et assez petite pour être considérée comme ponctuelle par rapport à l'écoulement macroscopique. Dans ce cas, tout volume élémentaire de fluide peut être caractérisé par des grandeurs thermodynamiques macroscopiques comme la pression, la température, la masse volumique. Le comportement du mélange gazeux réactif de volume V et de masse m, composé de $\mathcal{N}_{\text{sp}}$ espèces chimiques, est alors régi par les équations de Navier-Stokes qui expriment des principes de conservation de la masse totale, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Nous supposons aussi que le fluide considéré est du gaz est monophasique Newtonien. L'équilibre thermodynamique est considéré comme étant toujours établi. Le temps caractéristique du mouvement fluide est ainsi plus important que le délai de relaxation des molécules vers leur niveau d'équilibre thermodynamique.

2.2 Équations de conservation de l'aérothermochimie

Dans la forme présentée ci-après, les variables retenues pour décrire les lois de conservation sont la masse volumique, les fractions massiques Y_α, le vecteur vitesse u_i, l'énergie totale et et la pression P. Dans le cas général, l'écoulement peut être tridimensionnel, instationnaire, compressible ; le fluide est visqueux et n'est composé que d'une seule phase (gaz) ; les forces volumiques (pesanteur, ...) ainsi que les flux de chaleur volumique (rayonnement, ...) sont négligés. Nous adopterons la notation d'*Einstein*, ce qui permet d'alléger l'écriture des équations qui sont ici présentées sous forme différentielle :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, & \text{(2.1a)} \\ \dfrac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \dfrac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\dfrac{\partial P}{\partial x_i} + \dfrac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, & \text{(2.1b)} \\ \dfrac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \dfrac{\partial \rho e_t u_i}{\partial x_i} = -\dfrac{\partial p u_i}{\partial x_i} - \dfrac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dfrac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j}, & \text{(2.1c)} \\ \dfrac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho Y_\alpha (u_i + V_{\alpha i})\right) = \rho \dot{\omega}_\alpha, \text{ pour } \alpha = 1, \cdots, \mathcal{N}_{\text{sp}}, & \text{(2.1d)} \end{cases}$$

Les équations (2.1a) à (2.1d) représentent respectivement l'équation de conservation de la masse du mélange, de quantité de mouvement qui est obtenue par le principe fondamental de la dynamique, d'énergie totale (cinétique et interne, avec l'énergie interne contenant la

contribution sensible et de formation [1](cf. §2.3.3)). qui est obtenue par l'application du premier principe de la thermodynamique et enfin l'équation de conservation des espèces chimiques. Pour fermer ce système, il est nécessaire d'introduire une loi d'état telle que celle des gaz parfaits (2.10).

2.3 Propriétés thermochimiques des mélanges

Nous considérons un mélange, localement homogène, composé de $\mathcal{N}_{sp}$ espèces indicées $\alpha = 1, \cdots, \mathcal{N}_{sp}$ en équilibre de pression P et température T.

2.3.1 Variables thermochimiques

La masse volumique du mélange est obtenue à partir de la conservation de la masse par :

$$\rho = \sum_{\alpha}^{\mathcal{N}_{sp}} \rho_\alpha, \tag{2.2}$$

où ρ_α est la masse volumique partielle - ou concentration massique - de l'espèce α dans le mélange. Ceci induit la relation suivante donnant l'expression des fractions massiques Y_α :

$$\rho_\alpha = \rho Y_\alpha, \quad \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} Y_\alpha = 1, \tag{2.3}$$

La concentration molaire dans le mélange, variable utilisée dans l'évaluation des termes sources chimiques, s'exprime de la façon suivante :

$$C_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{W_\alpha} = \rho \frac{Y_\alpha}{W_\alpha}, \tag{2.4}$$

où W_α est la masse molaire de l'espèce α. La concentration molaire totale C du mélange est alors :

$$C = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} C_\alpha, \tag{2.5}$$

les fractions molaires X_α s'en déduisent en écrivant :

$$C_\alpha = C X_\alpha, \quad \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} X_\alpha = 1, \tag{2.6}$$

1. L'utilisation de l'énergie totale e_t présente l'avantage de ne pas faire apparaître de terme source lié à la production d'énergie par réaction chimique dans cette équation bilan. En effet, dans le cas où seulement l'énergie sensible et cinétique seraient utilisées pour écrire cette équation, il faudrait rajouter le taux de dégagement de chaleur $\rho\dot{\omega}_T$ (2.29) par réaction chimique.

et ainsi la masse molaire moyenne (du mélange) s'obtient par :

$$W = \left(\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} X_\alpha W_\alpha. \tag{2.7}$$

2.3.2 Équation d'état

La loi d'état permet de lier la pression P, la température T ainsi que la masse volumique et molaire du mélange. De manière générale, elle relie les variables extensives aux variables intensives. Dans le cas où le gaz est supposé parfait, la loi de Dalton permet de relier la pression partielle p_α de chaque espèce à la pression dans le mélange :

$$P = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} P_\alpha, \tag{2.8}$$

chaque espèce vérifie la loi d'état des gaz parfaits :

$$P_\alpha = \rho_\alpha \frac{\mathcal{R}}{W_\alpha} T = \rho_\alpha r_\alpha T, \tag{2.9}$$

avec $\mathcal{R}$ = 8.31451 J/K/mol la constante universelle des gaz parfaits, et $r_\alpha = \mathcal{R}/W_\alpha$ la constante massique du gaz. De (2.7), (2.8) et (2.9), la loi d'état du mélange est donnée par :

$$P = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} P_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho_\alpha \frac{\mathcal{R}}{W_\alpha} T = \rho \mathcal{R} T \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \frac{Y_\alpha}{W_\alpha}. \tag{2.10}$$

2.3.3 Énergie totale, énergie interne, enthalpie et chaleurs spécifiques

Plusieurs variables peuvent être utilisées afin de décrire la conservation de l'énergie d'un fluide multi-espèces. Nous distinguerons notamment les notions d'énergie et d'enthalpie : l'énergie donne la vision d'une évolution s'opérant à volume constant du système considéré, alors que l'enthalpie donne plutôt celle d'une évolution s'opérant à pression constante. Pour chaque espèce, nous pouvons alors écrire une forme dite "sensible" (liée uniquement à l'état thermodynamique de l'espèce), ou une forme dite "spécifique" (forme sensible à laquelle nous ajoutons l'enthalpie standard de formation de l'espèce, aussi appelée partie "chimique").

Pour chaque espèce, nous supposons que les chaleurs spécifiques ne dépendent que de la température. En supposant que les gaz constituant le mélange sont parfaits, l'énergie interne et l'enthalpie spécifique du mélange ne dépendent que de la température, et peuvent être liées à la température *via* les capacités calorifiques (ou chaleur) spécifiques à volume c_v et pression c_p constante. La chaleur spécifique à pression constante de l'espèce α à la pression standard $P^0 = 1$ atm en fonction de la température T est exprimée de façon standardisée à l'aide de la fonction polynomiale, dite de la NASA, ajustée à partir de données expérimentales

[98] par la relation :

$$c_{p,\alpha}(T,P^0) = \frac{\mathcal{R}}{W_\alpha}\left(a_{0,\alpha} + T\left(a_{1,\alpha} + T\left(a_{2,\alpha} + T\left(a_{3,\alpha} + a_{4,\alpha}T\right)\right)\right)\right). \tag{2.11}$$

L'enthalpie de l'espèce α est calculée à partir de l'expression suivante :

$$\begin{aligned} h_\alpha\left(T,P^0\right) &= \Delta h^0_{f,\alpha} + \int_{T^0}^{T} c_{p,\alpha}(\theta,P^0)\mathrm{d}\theta \\ &= \frac{R}{W_\alpha}\left(a_{5,\alpha} + T\left(a_{0,\alpha} + T\left(\frac{a_{1,\alpha}}{2} + T\left(\frac{a_{2,\alpha}}{3} + T\left(\frac{a_{3,\alpha}}{4} + \frac{a_{4,\alpha}}{5}T\right)\right)\right)\right)\right), \end{aligned} \tag{2.12}$$

avec $\Delta h^0_{f,\alpha}$ l'enthalpie de formation de l'espèce α à la pression standard $P^0 = 1$ atm et température de référence T^0 définie de manière à obtenir $h_\alpha\left(T^0,P^0\right) = \Delta h^0_{f,\alpha}$ [2]. L'entropie de l'espèce α est définie par :

$$\begin{aligned} S_\alpha\left(T,P^0\right) &= \Delta S^0_{f,\alpha} + \int_{T^0}^{T} \frac{c_{p,\alpha}(\theta,P^)}{\theta}\mathrm{d}\theta \\ &= \frac{\mathcal{R}}{W_\alpha}\left(a_{6,\alpha} + a_{0,\alpha}\ln T + T\left(a_{1,\alpha} + T\left(\frac{a_{2,\alpha}}{2} + T\left(\frac{a_{3,\alpha}}{3} + \frac{a_{4,\alpha}}{4}T\right)\right)\right)\right). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Les valeurs des coefficients polynomiaux $a_{n,\alpha}$ sont données dans les tables JANAF [251] [3]. La constante $a_{5,\alpha}$ (resp. $a_{6,\alpha}$) est choisi de façon à correspondre à une valeur correcte de l'enthalpie de formation $\Delta h^0_{f,\alpha}$ (resp. l'entropie de formation $\Delta S^0_{f,\alpha}$) à la température standard T^0. Il faut noter que Les coefficients $a_{n,\alpha}$ de chaque espèce dépendent du domaine de température dans lequel le mélange se situe. Il existe 7 coefficients pour les températures basses et 7 autres pour les températures hautes. Les températures basses s'étendent de 300 à 1000 K et les températures hautes de 1000 à 5000 K. Cependant, ces valeurs sont *a priori* définies indépendamment pour chaque espèce. Un ensemble de 14 coefficients et 3 températures est donc nécessaire pour chaque espèce. L'enthalpie spécifique du mélange, nécessaire typiquement pour le calcul correct de l'énergie interne, se calcule à partir des propriétés individuelles des espèces et ce en sommant les enthalpies de chaque espèce tout en les pondérant par la fraction massique correspondante :

$$h = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\mathrm{sp}}} Y_\alpha h_\alpha. \tag{2.14}$$

La même procédure est utilisée pour retrouver la chaleur spécifique à pression constante du

2. La température de référence est couramment fixée à $T^0 = 298.15$ K

3. Malgré l'amélioration de la qualité des données, plusieurs données demeurent manquantes ou incertaines. En effet, les cas où des fonctions thermodynamiques précises peuvent être mesurées directement sont l'exception plutôt que la règle. Dans la plupart des cas, les fonctions thermochimiques en phase gazeuse sont dérivées en établissant des fonctions de partition à partir de données spectroscopiques expérimentales, et deux principales difficultés apparaissent [181]. Tout d'abord, bien que la mise en place de fonctions de partition exactes soit triviale pour les atomes et simple pour les molécules diatomiques, ce n'est pas le cas pour les polyatomiques. Deuxièmement, l'ensemble complet de constantes spectroscopiques anharmoniques et / ou de champs de force ne sont connus que pour très peu de molécules polyatomiques. Dans la plupart des autres cas, l'approximation du rotateur rigide-oscillateur harmonique est faite, ce qui conduit à de grandes erreurs aux hautes températures.

mélange :

$$c_p = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} Y_k c_{p,\alpha}. \tag{2.15}$$

Quant à la chaleur spécifique à volume constant du mélange c_v, elle est donnée par la relation de Mayer [40] :

$$c_v = c_p - \frac{\mathcal{R}}{W}. \tag{2.16}$$

L'entropie du mélange s'écrit comme :

$$S = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} S_\alpha \left(Y_\alpha - \mathcal{R} \ln\left(\frac{P}{P^0}\right) - \mathcal{R} \ln(Y_\alpha) \right). \tag{2.17}$$

D'après l'équation (2.12), la dépendance non linéaire des chaleurs spécifiques à pression constante avec la température empêche le calcul direct de la température à partir de l'énergie totale :

$$e_t = h - P/\rho. \tag{2.18}$$

Cette dernière quantité étant fournie directement par les équations de Navier-Stokes, il est donc nécessaire d'utiliser un algorithme itératif permettant d'estimer la valeur de la température du mélange à partir de son énergie totale. Cet algorithme sera présenté dans la section §3.1.5.

2.4 Cinétique chimique et taux de réaction

La combustion est une réaction chimique exothermique mettant en jeu principalement un combustible (réducteur) $\mathscr{C}$ et un oxydant $\mathscr{O}$ et produisant des produits $\mathscr{P}$. La façon la plus simple de décrire une réaction chimique est donnée par l'équation globale suivante :

$$\nu'_{\mathscr{C}} \mathscr{C} + \nu'_{\mathscr{O}} \mathscr{O} \rightarrow \nu''_{\mathscr{P}} \mathscr{P}, \tag{2.19}$$

où $\nu'_{\mathscr{C}}$, $\nu'_{\mathscr{O}}$ et $\nu''_{\mathscr{P}}$ désignent, respectivement, les coefficients stœchiométriques du combustible, de l'oxydant et des produits. Ce bilan, global et irréversible, ne détaille pas les mécanismes mis en jeu au cours du processus chimique et ne peut donner qu'une estimation de l'état final et des caractéristiques des flammes : délai d'auto-inflammation, vitesse fondamentale, structure des fronts de flamme, limite d'extinction etc. Pour connaître avec précision ces caractéristiques, il faut considérer un mécanisme de combustion plus détaillé, composé de plusieurs réactions élémentaires réversibles faisant intervenir toutes les espèces produites au cours de la combustion.

Considérons une réaction chimique constituée de nombreuses réactions élémentaires ; l'ensemble de ces $\mathcal{N}_{\text{re}}$ réactions constituent le schéma réactionnel qui peut se résumer par

l'équation suivante :

$$\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu'_{\alpha i} M_{\alpha i} \underset{k_{r,i}}{\overset{k_{f,i}}{\rightleftharpoons}} \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu''_{\alpha i} M_{\alpha i}, \quad \forall i \in [\![1, \mathcal{N}_{\text{re}}]\!], \tag{2.20}$$

ou de manière générale :

$$\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{\alpha i} M_{\alpha i} = 0, \quad \nu_{\alpha i} = \nu''_{\alpha i} - \nu'_{\alpha i}, \tag{2.21}$$

où $M_{\alpha i}$ symbolise l'espèce chimique α de la réaction i et $(\nu'_{\alpha i}, \nu''_{\alpha i})$ les coefficients stœchiométriques du réactif et du produit, respectivement. Les quantités k_{fi} et k_{ri} sont respectivement, les constantes de réaction de la $i^{\text{ème}}$ réaction directe (*forward*) et de la $i^{\text{ème}}$ réaction inverse / indirect[4] (*reversed / backward*). Le taux d'avancement de la réaction chimique Q_i de la $i^{\text{ème}}$ réaction (relation de Guldberg et Waage [106]) s'écrit alors :

$$Q_i = k_{f,i} \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} C_\alpha^{\nu'_{\alpha i}} - k_{r,i} \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} C_\alpha^{\nu''_{\alpha i}}, \tag{2.22}$$

où C_α est la concentration molaire de l'espèce α. Pour qu'il y ait réaction chimique, il doit y avoir rencontre entre les réactifs. La probabilité de rencontre sera d'autant plus grande que leur concentration sera élevée. La vitesse de réaction est donc proportionnelle à la concentration des réactifs. Par ailleurs, la température a aussi un effet sur la vitesse de réaction. En effet, lorsqu'elle est élevée, l'agitation thermique augmente et les rencontres sont plus probables. De plus, les particules auront une énergie cinétique plus grande, permettant de franchir la barrière d'activation de la réaction. La constante de vitesse k_{fi} pour ce taux d'avancement de la réaction directe est généralement modélisée par une loi d'Arrhenius modifiée [185] :

$$k_{f,i} = A_{f,i} T^{\beta_i} \exp\left(-\frac{T_{a,i}}{T}\right), \tag{2.23}$$

où $A_{f,i}$ désigne le facteur de fréquence (ou pré-exponentiel) qui modélise la fréquence des collisions entre molécules, $T_{a,i} = E_{a,i}/\mathcal{R}$ est la température d'activation nécessaire pour amorcer la réaction et β_i l'exposant de température. Ces grandeurs contrôlent la vitesse de combustion et sont déterminées expérimentalement. Elles dépendent de la $i^{\text{ème}}$ réaction considérée, de la température et de la pression (celles-ci interviennent dans la masse volumique utilisée pour estimer la concentration C_α), par ailleurs, ce sont ces quantités qui vont contrôler la vitesse de combustion en fonction des valeurs de β_i et $T_{a,i}$. Lu et Law [169] ont proposé une expression minimisant le coût de calcul et prenant en compte les différentes classes de

4. Dans le cas d'une réaction irréversible $k_{ri} = 0$.

réactions précédemment citées :

$$k_{f,i} = \begin{cases} A_i & \text{si } \beta = 0 \text{ et } T_{a,i} = 0\,, \\ \exp\left(\log A_i + \beta_i \log T\right) & \text{si } \beta_i \neq 0 \text{ et } T_{a,i} = 0\,, \\ \exp\left(\log A_i + \beta_i \log T - T_{a,i}/T\right) & \text{si } \beta_i \neq 0 \text{ et } T_{a,i} \neq 0\,, \\ \exp\left(\log A_i - T_{a,i}/T\right) & \text{si } \beta_i = 0 \text{ et } T_{a,i} \neq 0\,, \\ A_i \prod^{\beta_i} T & \text{si } T_{a,i} = 0 \text{ et } \beta_i \in \mathbb{Z}\,, \end{cases} \tag{2.24}$$

où $\mathbb{Z}$ l'ensemble des entiers relatifs. Pour les réactions réversibles, l'avancement de la réaction inverse s'exprime en supposant l'équilibre thermodynamique (loi d'action de masse) :

$$k_{r,i} = \frac{k_{f,i}}{\mathfrak{K}_{\text{eq},i}} \tag{2.25}$$

$\mathfrak{K}_{\text{eq},i}$ la constante d'équilibre qui est déduite de la minimisation de l'énergie libre de Gibbs $G = h - TS$ en utilisant l'équation d'état des gaz parfaits (Warnatz *et al.* [275]) :

$$\mathfrak{K}_{\text{eq},i} = \mathfrak{K}_{p,i} \left(\frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{\alpha,i}}, \quad \mathfrak{K}_{p,i} = \exp\left(\frac{\Delta S_i}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta h_i}{\mathcal{R}T}\right) = \exp\left(\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{\alpha,i} \left(\frac{S_\alpha}{\mathcal{R}} - \frac{h_\alpha}{\mathcal{R}T}\right)\right), \tag{2.26}$$

où ΔS_j et Δh_j sont les variation d'entropie, respectivement d'enthalpie, molaire de la $i^{\text{ème}}$ réaction chimique. En combinant les équations (2.12) et (2.17) et en combinant les expression de $\mathfrak{K}_{\text{eq},i}$ et $\mathfrak{K}_{p,i}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \mathfrak{K}_{\text{eq},i} &= \left(\frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki}} \exp\left(\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki} \left(\frac{S_k^0}{\mathcal{R}} - \frac{h_k^0}{\mathcal{R}T}\right)\right) \\ &= \left(\frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}}\right)^{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki}} \exp\left(\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki} \left(-\ln T + \frac{S_k^0}{\mathcal{R}} - \frac{h_k^0}{\mathcal{R}T}\right)\right) \\ &= \left(\frac{P_{\text{atm}}}{\mathcal{R}}\right)^{\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki}} \exp\left(\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \nu_{ki} B_k\right). \end{aligned} \tag{2.27}$$

Les coefficients B_k peuvent s'exprimer en fonction de la température par le biais des équations (2.12) et (2.17) :

$$\begin{aligned} B_k &= -\ln T + \frac{S_\alpha}{\mathcal{R}} - \frac{H_\alpha}{\mathcal{R}T} \\ &= a_{6,k} - a_{0,k} + (a_{0,k} - 1)\ln T + T\left(\frac{a_{1,k}}{2} + T\left(\frac{a_{2,k}}{6} + T\left(\frac{a_{3,k}}{12} + \frac{a_{4,k}}{20}T\right)\right)\right) - \frac{a_{5,k}}{T}. \end{aligned}$$

Finalement, l'ensemble des réactions chimiques élémentaires conduisent à un taux de production de l'espèce α, égal à la somme de tous les taux faisant intervenir cette espèce, ainsi :

$$\dot{\omega}_\alpha = \frac{W_\alpha}{\rho} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{\text{re}}} \nu_{\alpha i} Q_i, \tag{2.28}$$

et par conséquent, la conservation des espèces implique que $\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \dot{\omega}_\alpha = 0$. Par ailleurs le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ correspond à l'opposé de la somme pondérée de tous ces taux de production par leurs enthalpies standards de formation :

$$\dot{\omega}_T = -\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} \Delta h^0_{f\alpha} \dot{\omega}_\alpha. \tag{2.29}$$

Éventuellement, le calcul du taux de réaction peut faire appel à des réactions particulières, telles que celles dépendantes de la pression ou bien celles impliquant un troisième corps (cf. annexe §A).

2.5 Propriétés du transport détaillé

Dans cette section, l'attention est portée sur les phénomènes de transport moléculaire s'opérant dans le mélange multi-espèce. Celui-ci est la résultante des interactions au niveau moléculaire entre les différents constituants du gaz tendant à amenuir les gradients macroscopiques présents dans un fluide et représentant un écart à la distribution de Maxwell (sous l'hypothèse d'un équilibre thermodynamique local). A partir de la théorie de la cinétique des gaz, plusieurs flux diffusifs sont mis en évidence lors de l'écriture de l'équation de transport des masses volumiques partielles, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. Dans ce travail, ils sont évalués en suivant l'approche décrite par Ern et Giovangigli [77]. Cette stratégie repose sur l'emploi d'une méthode itérative pour obtenir une solution approchée aux systèmes de transport. Le lecteur peut se référer à l'article de Ern et Giovangigli [77] pour de plus amples détails.

2.5.1 Tenseur des contraintes visqueuses

Pour un fluide Newtonien, comme c'est le cas des gaz, le tenseur des contraintes visqueuses est obtenu à partir du taux de déformation :

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right), \tag{2.30}$$

et s'écrit :

$$\tau_{ij} = \kappa S_{kk}\delta_{ij} + 2\mu\left(S_{ij} - \frac{1}{3}S_{kk}\delta_{ij}\right), \tag{2.31}$$

où δ_{ij} désigne le symbole de Kronecker, κ la viscosité volumique (*bulk viscosity*) du mélange et μ la viscosité dynamique (ou viscosité de cisaillement) du mélange. L'équation (2.31) montre que le flux de diffusion de quantité de mouvement repose sur deux phénomènes. Le premier reflète la relation biunivoque existant entre l'énergie cinétique de translation d'une particule et ses niveaux d'énergie interne liés aux énergies de rotation et de vibration. Ces phénomènes sont traduits par le bais de la viscosité volumique κ. Le deuxième terme du flux de quantité

de mouvement concerne les échanges entre particules voisines et est modélisé par la viscosité de cisaillement μ.

2.5.2 Flux de masse surfacique

D'après la théorie cinétique des gaz, le flux de diffusion de l'espèce α dans la direction x_i s'obtient en résolvant de façon précise le système de Stefan-Maxwell-Boltzmann où les inconnues sont les $V_{\alpha,i}$:

$$\frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \frac{X_\alpha X_j}{D_{\alpha,j}}(V_{j,i} - V_{\alpha,i}) + (Y_\alpha - X_\alpha)\frac{\partial(\ln P)}{\partial x_i} + \frac{\rho}{P}\sum_{j=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} Y_\alpha Y_j (f_\alpha - f_j), \tag{2.32}$$

où f_j représente les forces volumiques qui s'opèrent sur l'espèce j. Cependant, cette résolution est trop coûteuse (il s'agit d'un système linéaire de taille $\mathcal{N}_{\text{sp}}^2$) car elle doit se réaliser en chaque point et suivant chaque direction du domaine. L'utilisation de l'approximation de Curtiss et Hirschfelder [55] permet de retenir seulement les termes diagonaux du système et fournit une solution analytique. Ains, en supposant les forces extérieures nulles, le flux de masse surfacique s'exprime de la manière suivante :

$$\rho Y_\alpha V_{\alpha,i} = -\sum_{\beta=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho \widetilde{D}_{\alpha,\beta} d_{\beta,i} - \rho Y_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \tag{2.33}$$

$$= -\sum_{\beta=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho \widetilde{D}_{\alpha,\beta} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_i} - \sum_{\beta=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho \widetilde{D}_{\alpha,\beta}(X_\beta - Y_\beta)\frac{\partial \ln P}{\partial x_i} - \rho Y_\alpha \theta_\alpha \frac{\partial \ln T}{\partial x_i}, \tag{2.34}$$

avec $V_{\alpha i}$ la vitesse de diffusion de l'espèce α dans la direction x_i telle que $\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} Y_\alpha V_{\alpha i} = 0$, $d_{\beta,i}$ le vecteur de diffusion qui s'exprime par :

$$d_{\beta,i} = \frac{\partial X_\beta}{\partial x_i} + (X_\beta - Y_\beta)\frac{\partial \ln P}{\partial x_i}, \tag{2.35}$$

Dans les expression précédentes, la variable $\widetilde{D}_{\alpha,\beta} = Y_\alpha D_{\alpha,\beta}$ représente le coefficient du flux de diffusion, avec $D_{\alpha\beta}$ le coefficient de diffusion binaire entre l'espèce α et β, $\widetilde{\chi}_\alpha = \chi_\alpha / X_\alpha$ est le rapport de la diffusion thermique normalisé qui est définie de sorte que $D_{\alpha,\beta} X_\beta \widetilde{\chi}_\alpha = \theta_\alpha$, avec θ_α le coefficient de diffusion thermique de l'espèce α. Finalement, dans le second membre de l'équation (2.34), le premier terme de représente la diffusion due aux gradients de fraction molaire (ou de concentration), le deuxième terme représente la diffusion due à la pression (ou *diffusion barotrope*). Enfin, le dernier terme, appelé *effet Soret*, représente l'effet de la diffusion thermique due aux gradients température. Il a pour effet de faire migrer les espèces légères vers les régions chaudes et les espèces lourdes vers les régions froides.

2.5.3 Flux de chaleur surfacique

Le flux de chaleur surfacique dans la direction x_i s'exprime comme suit :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho Y_\alpha V_{\alpha,i} h_\alpha - P \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \theta_\alpha d_{\alpha,i} \tag{2.36}$$

$$= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho Y_\alpha V_{\alpha,i} h_\alpha - P \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \chi_\alpha V_{\alpha,i} \tag{2.37}$$

$$= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho Y_\alpha V_{\alpha,i} h_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho Y_\alpha V_{\alpha,i} \frac{RT\widetilde{\chi}_\alpha}{W_\alpha}, \tag{2.38}$$

avec λ la conductivité thermique du mélange. Dans le deuxième membre de l'équation (2.38), le premier terme représente la conduction par gradients de température (loi de Fourier),le deuxième représente le flux d'enthalpies partielles des différentes espèces. Enfin, le dernier terme représente l'effet des es gradients de concentration (*effet Dufour*).

2.5.4 Calcul des coefficients du transport détaillé

Tous les coefficients de transport qui interviennent dans les équations précédentes, *i.e.* κ, μ, λ, $\widetilde{D}_{\alpha,\beta}$ et $\widetilde{\chi}_\alpha$, sont fonction des propriétés du mélange, c'est-à-dire de la pression, de la température et des fractions massiques des espèces (cf. annexe §B). La théorie cinétique des gaz ne donne pas d'expressions explicites directes pour ces coefficients de transport, mais conduit plutôt à des systèmes linéaires qui doivent être résolus [45, 84, 76, 276]. La structure mathématique générale de ces systèmes a été obtenue [76] selon des hypothèses très générales. En particulier, il a été montré dans les références [76, 77] que les coefficients de transport peuvent être développés sous forme de séries convergentes. De plus, de nouveaux systèmes linéaires et des expressions approximatives ont été obtenus pour tous les coefficients de transport du mélange. Plusieurs algorithmes de calcul optimisé de ces coefficients ont été développés et sont inclus dans la librairie Fortran `EGLIB` [78]. Cette dernière est couplée au solveur `CREAMS` et a été validée et utilisée par Martinez-Ferrer (2013) [182], Techer (2017) [253] et Buttay *et al.* (2018) [37]. La librarie `EGLIB` contient plusieurs routines pour le calcul de chaque coefficient de transport. Par exemple, l'ensemble des routines calculant κ portent le nom de `EGSK`**m**, où l'entier **m** attaché au nom de la routine indique les différentes méthodes / modèles utilisés pour l'évaluation de κ. Cet entier varie de 2 à 6 ; la plus grande valeur correspond à la routine la plus coûteuse en terme de calcul et la plus précise. Dans le cadre de cette thèse, afin d'assurer un bon compromis précision-temps de calcul et sauf indication contraire, on utilise les routines de la librairie `EGlib` listées dans le Tableau 2.1 et qui ont été également utilisées par Billet *et al.* [17] pour l'étude de l'interaction entre une bulle d'hydrogène et une onde de choc normale.

routine	coefficient évalué
EGSK3	viscosité volumique κ dans le cas de la simulation où il est n'est pas nul
EGSE3	viscosité dynamique
EGSDR2	coefficients intervenant dans l'évaluation des flux de diffusion
EGSLCT3	conductivité thermique et le rapport de diffusion thermique normalisé

***Tableau 2.1** – Routines utilisées pour le calcul des coefficients de transport*

2.6 Lois simplifiées de transport

La résolution des systèmes d'évaluation des coefficient de transport détaillé de la section précédente §2.5 peut devenir coûteuse en temps de calcul, c'est pourquoi de nombreux auteurs utilisent plutôt une des formes simplifiées des propriétés de transport présentées ci-après.

Tenseur des contraintes visqueuses simplifié : l'hypothèse de Stokes nous permet de négliger l'effet de la viscosité volumique κ dans le tenseur de contraintes. Cette simplification peut être remise en cause dans certains types d'écoulements qui seront discutés ultérieurement dans ce manuscrit.

Flux de masse simplifié : la description simplifiée de ce flux consiste à négliger les effets *Soret*. Dans cette approche, les coefficients de transport de chaque espèce sont déterminés explicitement à l'aide des expressions issues de la théorie cinétique des gaz. Une formulation moyenne du mélange [139] est retenue pour la description des flux de diffusion d'espèces en remplaçant (2.34) par une version *modifiée* de l'approche de Curtiss et Hirschfelder [55] :

$$\begin{aligned} \rho Y_\alpha V_{\alpha,j} &= -\rho D_{m,\alpha} \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha V_c \\ &= -\rho D_{m,\alpha} \frac{W_\alpha}{W} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_j} + \rho Y_\alpha \sum_{\beta=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} D_{m,\beta} \frac{W_\beta}{W} \frac{\partial X_\beta}{\partial x_j}, \end{aligned} \tag{2.39}$$

Le dernier terme correctif est introduit pour assurer la conservation de la masse globale du mélange [216], *i.e.* $\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} Y_\alpha V_{\alpha,j} = 0$. Dans cette expression, la matrice des coefficients de diffusion binaires. $\tilde{D}_{\alpha,\beta}$ est remplacée par la matrice des coefficients de diffusion de la $\alpha^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange, $D_{m,\alpha}$, en négligeant les effets de diffusion différentielle.

Flux de chaleur simplifié : dans cette expression, l'effet *Dufour* est négligé. Le flux de chaleur prend la forme modifiée suivante :

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \rho Y_\alpha V_{\alpha,j} h_\alpha. \tag{2.40}$$

Calcul des coefficients de transport simplifié : les expressions des coefficients de transport μ et λ varient par rapport à celles qui correspondent à la description détaillée. Ceux-ci sont évalués, avec $D_{m,\beta}$, à l'aide de la librairie CHEMKIN [141, 139].

Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous venons de présenter les principales relations thermodynamiques permettant de décrire un mélange de gaz parfaits et quelques éléments théoriques et fondamentaux sur les réactions chimiques. Nous avons également rappelé les équations de Navier–Stokes ainsi que la modélisation des flux moléculaires et des coefficients de transport associés. Ces derniers sont calculés à l'aide de la librairie `EG1IB` tandis que la librairie `CHEMKIN` est utilisée pour évaluer les propriétés de transport simplifiées et la cinétique chimique considérée à partir des différents mécanismes réactionnels. La chapitre suivant sera consacré à l'exposition des outils numériques implémentés dans le code de calcul `CREAMS`.

3

Présentation et prise en main de CREAMS

Mini-sommaire

3.1 Outils numériques **22**
- 3.1.1 Discrétisation spatiale des flux convectifs 22
- 3.1.2 Discrétisation spatiale des flux diffusifs 26
- 3.1.3 Intégration temporelle 27
- 3.1.4 Critères de stabilité numérique 29
- 3.1.5 Température du mélange 29

3.2 Conditions aux limites non-réfléchissantes et absorbantes **30**
- 3.2.1 Conditions aux limites non-réfléchissantes 30
- 3.2.2 Conditions aux limites absorbantes 34
- 3.2.3 Relations de Rankine-Hugoniot 34

3.3 Cas tests numériques **37**
- 3.3.1 Problèmes de Riemann bidimensionnels 37
- 3.3.2 Tube à choc inerte multi-espèces 37
- 3.3.3 Flamme laminaire pré-mélangée d'hydrogène et oxygène 39
- 3.3.4 Transport d'un vortex 40
- 3.3.5 Interaction choc-tourbillon 42

L'objectif de ce chapitre est de présenter les méthodes numériques implémentées dans le code CREAMS. Nous allons faire nos calculs en résolvant directement les équations de Navier-Stokes avec une approche DNS. Nous soulignons ici que la simulation des écoulements compressibles, réactifs et turbulents avec ce calcul direct est une tâche assez complexe et très coûteuse en temps CPU. Les difficultés sont associées à la discrétisation nécessaire pour résoudre les plus petites échelles de l'écoulement considéré. En effet, ces calculs directs mettent en œuvre des échelles spatiales et temporelles variées associées aux différents phénomènes physiques et chimiques impliqués. Cela conduit à un système d'équations particulièrement raide. Une difficulté à prendre en compte est celle liée à la résolution simultanée des équations du mouvement et des espèces chimiques, en tenant compte de l'intégration des termes sources chimiques associés. Les schémas numériques se doivent d'être :

- le moins dispersifs possible ;
- le plus robustes possible pour simuler des écoulements dans des domaines où la physique est complexe (combustion avec propagation de flamme, simulations supersoniques avec choc, etc) ;
- capables de résoudre correctement les discontinuités de contact ;
- capables de résoudre correctement les fluctuations liées à la turbulence et à la combustion (flammes plissées, oscillation de flamme,$\cdots$).

Nous exposons en détails les méthodes numériques utilisées (discrétisation spatiale et temporelle et conditions aux limites). Ces outils ont été développés et optimisés au sein du laboratoire Pprime au sein de l'équipe combustion turbulente, et ce à travers plusieurs travaux [36, 182, 183, 253]. Nous validerons ensuite la bonne implémentation de ces méthodes par le biais de plusieurs cas tests.

3.1 Outils numériques

Le système d'équation (3.1) est un système d'équations différentielles de convection-diffusion couplées avec des termes sources :

$$\underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t}}_{\text{Contribution Temporelle}} = \underbrace{\overbrace{-\frac{\partial \boldsymbol{F_1}}{\partial x_1} - \frac{\partial \boldsymbol{F_2}}{\partial x_2} - \frac{\partial \boldsymbol{F_3}}{\partial x_3}}^{\text{Terme Convectif}} + \overbrace{\frac{\partial \boldsymbol{G_1}}{\partial x_1} + \frac{\partial \boldsymbol{G_2}}{\partial x_2} + \frac{\partial \boldsymbol{G_3}}{\partial x_3}}^{\text{Terme Diffusif}}}_{\text{flux}} \underbrace{+\boldsymbol{S}}_{\text{Source}}, \tag{3.1}$$

où $\boldsymbol{Q}$ représente le vecteur des variables conservées, $\boldsymbol{F_j}$ les termes convectifs (dépendant de $\boldsymbol{Q}$), $\boldsymbol{G_j}$ les termes diffusif (dépendant de $\boldsymbol{Q}$ et de ses dérivés spatiales) et $\boldsymbol{S}$ le terme source. D'un point de vue mathématique, les termes intervenant dans l'équation (3.1) ont des propriétés différentes et nécessitent chacun un traitement particulier. Par conséquent, une discrétisation purement centrée n'est pas admissible pour des raisons de stabilité. Les termes elliptiques, par contre, peuvent être traités par le biais de schémas centrés. La difficulté essentielle apparaissant lors de la résolution du système complet se situe donc dans le traitement numérique adéquat des termes convectifs, c'est-à-dire : du système hyperbolique constitué des termes différentiels d'ordre un, ceci constituera l'objet de la section suivante §3.1.1

3.1.1 Discrétisation spatiale des flux convectifs

Nous allons tout d'abord nous intéresser à la partie hyperbolique du système complet 3.1. Cette partie décrit le mouvement d'un fluide compressible non visqueux, sans terme de production. La méthode de discrétisation spatiale s'applique indépendamment à chaque direction du maillage. Il suffit donc de la présenter en considérant une seule direction, qu'on choisit être $x \equiv x_1$. Dans cette direction, la partie hyperbolique prend la forme conservative

suivante :

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} = 0, \tag{3.2}$$

où $\boldsymbol{Q} = (\rho, \rho u_1, \rho e_t, \rho Y_1, \ldots, \rho Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}})^t$ est le vecteur des variables conservées et $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}) \equiv \boldsymbol{F_1}(\boldsymbol{Q})$ est le vecteur des flux convectifs dans la direction $j = 1$ donné par $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}) := u_1 \boldsymbol{Q} + p(0, 1, u_1, 0, \ldots, 0)^t$. Nous utilisons ici l'approche classique aux différences finies pour trouver une solution numérique approchée de l'équation (3.2). Pour un domaine de calcul Ω, discrétisé régulièrement en N points, $x_i = i\Delta x$ pour $i = 1, \ldots, N$, avec Δx le pas de discrétisation spatiale, l'approximation numérique Q_i de la solution exacte $\boldsymbol{Q}$ satisfait le système d'équations différentielles ordinaires :

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} = \mathfrak{L}(Q_i) = -\frac{1}{\Delta x}\left(\hat{f}_{i+1/2} - \hat{f}_{i-1/2}\right), \tag{3.3}$$

où $\mathfrak{L}$ est l'opérateur de discrétisation qui dépend de Q_i. Les quantités $\hat{f}_{i+1/2}$ et $\hat{f}_{i-1/2}$ sont les approximations numériques aux interfaces $i + 1/2$ et $i - 1/2$, respectivement, des flux eulériens $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}(x_{i+1/2}))$ et $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{Q}(x_{i-1/2}))$. L'opérateur de discrétisation spatiale $\mathfrak{L}(Q_i)$ est évalué à l'aide d'un schéma `WENO` précis à l'ordre 7, désigné dans la suite par `WENO7`. Nous décrirons dans la suite de cette section la procédure utilisée pour la famille des schémas `WENO`.

La famille des schémas `ENO` (*essentially non-oscillatory*) et `WENO` (*weighted essentially non-oscillatory*) d'ordre élevé a été développée dans le but de résoudre des écoulements comportant des régions où les propriétés du fluide (pression, vitesse, masse volumique, viscosité...) peuvent présenter des variations extrêmement brusques "sauts" telles que celles rencontrées dans les ondes de choc, les discontinuités de contact et les interfaces liquide-gaz. Les schémas `ENO`, introduits par [114], utilisent un algorithme local non linéaire pour choisir un stencil candidat évitant ainsi les possibles discontinuités dans les solutions lors de l'interpolation des flux numériques. Les flux numériques calculés avec cette procédure n'introduisent pas d'oscillation non physique. Les schémas `WENO` [241, 11, 166, 285, 240] constituent une amélioration des schémas `ENO` car ils utilisent une superposition de tous les stencils candidats pour l'interpolation des flux, au lieu d'un seul stencil utilisé dans la procédure des schémas `ENO`. Ceci veut dire que dans les régions de l'écoulement où il n'y a pas de discontinuité, tous les stencils sont utilisés pour effectuer l'interpolation, ce qui permet d'augmenter l'ordre du schéma. Néanmoins, proche des discontinuités, l'ordre de précision du schéma est réduit. Cette ordre peut diminuer jusqu'à celui du schéma `ENO` équivalent dans le cas où un seul stencil candidat est choisi par l'algorithme d'assignation des poids.

L'interpolation directe des flux des variables conservatives $\hat{f}_{i+1/2}$ et $\hat{f}_{i-1/2}$ dans (3.3) est possible. Cependant, pour éviter des oscillations en raison des discontinuités présentes dans l'écoulement, il est recommandé d'interpoler les flux caractéristiques. Une fois que la procédure d'interpolation dans le champ caractéristique est réalisée, les flux conservatifs en sont déduits. Le système d'équations (3.2), exprimé sous forme conservative, peut être réécrit sous forme caractéristique. Pour ce faire, il suffit de multiplier le système (3.2) par la matrice

des vecteurs propres à droite $\boldsymbol{R}^{-1}$ du jacobien du flux :

$$\boldsymbol{R}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \boldsymbol{R}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} = \frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}_s}{\partial x} = 0, \tag{3.4}$$

où $\boldsymbol{W}$ et $\boldsymbol{F}_s$ sont les vecteurs des variables et des flux caractéristiques, respectivement. Le flux caractéristique est discrétisé selon :

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}_s}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left(\hat{f}_{s,i+1/2} - \hat{f}_{s,i-1/2}\right), \tag{3.5}$$

où $\hat{f}_{s,i+1/2}$ et $\hat{f}_{s,i-1/2}$ sont les approximations numériques aux interfaces $i+1/2$ et $i-1/2$ des flux caractéristiques $\boldsymbol{F}_s(\boldsymbol{W}(x_{i+1/2}))$ et $\boldsymbol{F}_s(\boldsymbol{W}(x_{i-1/2}))$, respectivement. La matrice de vecteurs propres à droite est aussi évaluée aux interfaces $i+1/2$ et $i-1/2$ à l'aide de la moyenne de *Roe* entre les points i et $i+1$, et entre les points i et $i-1$, respectivement. Ensuite, les flux caractéristiques sont décomposés en deux parties $\boldsymbol{F}_s(\boldsymbol{W}) = \boldsymbol{F}_s^+(\boldsymbol{W}) + \boldsymbol{F}_s^-(\boldsymbol{W})$, de telle sorte que $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_s^+(\boldsymbol{W})/\mathrm{d}\boldsymbol{W} \geqslant 0$ et $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_s^-(\boldsymbol{W})/\mathrm{d}\boldsymbol{W} \leqslant 0$. Cette décomposition est effectuée selon la méthode locale de Lax-Friedrichs (LLF ou *local Lax-Friedrichs*) :

$$\boldsymbol{F}_s^{\pm}(W) = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{F}_s(\boldsymbol{W}) \pm \|\boldsymbol{\Lambda}\|_{\max}\boldsymbol{W}\right), \tag{3.6}$$

avec $\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{d}\boldsymbol{F}_s(\boldsymbol{W})/\mathrm{d}\boldsymbol{W}$ étant la matrice des valeurs propres du système (3.2). Les flux caractéristiques numériques correspondant, $\hat{f}^{\pm}_{s,i+1/2}$ et $\hat{f}^{\pm}_{s,i-1/2}$, sont reconstruits par interpolation essentiellement non oscillante sur les stencils candidats du schéma WENO7 (cf. Figure 3.1). Pour des raisons de simplicité, seule la procédure de calcul des flux $\hat{f}^{+}_{s,i+1/2}$ sera considérée dans la suite. L'évaluation de $\hat{f}^{-}_{s,i+1/2}$ se fait symétriquement par rapport à l'interface $i+1/2$. En outre, l'évaluation des flux numériques en $i-1/2$ est similaire à celle réalisée en $i+1/2$. La procédure du schéma ENO d'ordre $r=4$ retient un seul stencil parmi les r stencils candidats pour évaluer les flux numériques donnée par :

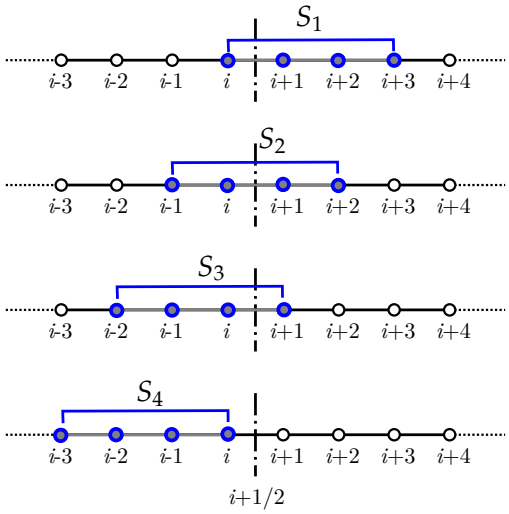


Figure 3.1. *Stencils candidats pour l'évaluation du flux numérique $\hat{f}^{+}_{s,i+1/2}$ par interpolation essentiellement non oscillante du schéma WENO7.*

$$S_k = (x_{i+k-r+1}, x_{i-k+r+2}, \ldots, x_{i+k}), \quad k = 0, \ldots, r-1. \tag{3.7}$$

Cependant, dans l'approche WENO7, d'ordre $2r-1=7$, l'interpolation s'effectue sur tous les

stencils candidats :

$$\hat{f}^{+}_{s,i+1/2} = \sum_{k=0}^{r-1} \omega^r_k \hat{f}^{+(k)}_s \left(x_{i+1/2}\right), \tag{3.8}$$

avec :

$$\hat{f}^{+(k)}_{s,1+1/2} = \sum_{l=0}^{r-1} a^r_{kl} \psi(x_{i+k-r+1+l}) = \hat{f}^{+(k)}_s \left(x_{i+1/2}\right) + \mathcal{O}\left(\Delta x^{2r-1}\right), \tag{3.9}$$

où l'on a noté $\psi(x) = F^+_s(W(x))$ et a^r_{kl} sont les coefficients d'interpolation de Lagrange. L'équation (3.9) s'écrit explicitement :

$$\begin{cases} \hat{f}^{+(0)}_{s,i+1/2} = -\frac{1}{4}\psi(x_{i-3}) + \frac{13}{12}\psi(x_{i-2}) - \frac{23}{12}\psi(x_{i-1}) + \frac{25}{12}\psi(x_i) \\ \hat{f}^{+(1)}_{s,i+1/2} = \frac{1}{12}\psi(x_{i-2}) - \frac{5}{12}\psi(x_{i-1}) + \frac{13}{12}\psi(x_i) + \frac{1}{4}\psi(x_{i+1}) \\ \hat{f}^{+(2)}_{s,i+1/2} = -\frac{1}{12}\psi(x_{i-1}) + \frac{7}{12}\psi(x_i) - \frac{7}{12}\psi(x_{i+1}) - \frac{1}{12}\psi(x_{i+2}) \\ \hat{f}^{+(3)}_{s,i+1/2} = \frac{1}{4}\psi(x_i) + \frac{13}{12}\psi(x_{i+1}) - \frac{5}{12}\psi(x_{i+2}) + \frac{1}{12}\psi(x_{i+3}) \end{cases}$$

Les coefficients ω^r_k sont tels que $\sum_{k=0}^{r-1} \omega^r_k = 1$ (combinaison convexe). Ils sont calculés de deux façons différentes :

- les ω^r_k, sont fonction de la régularité de la solution. Le stencil où la solution est la plus régulière localement sera privilégié. ω^r_k est local à la maille. On parlera dans ce cas de `WENO7` à poids pondérés ;
- les ω^r_k sont fixés de façon à ce que la décomposition suivant les stencils tendent vers des valeurs optimales qui permettent d'aboutir à un schéma précis à l'ordre $2r-1$, et on parlera dans ce cas de `WENO7` optimal.

Ainsi, dans les régions où l'écoulement ne contient pas de discontinuité, les poids normalisés pondérant la contribution du flux provenant de chaque stencil dans leur première version sont donnés par $\omega^r_k = \alpha^r_k / \sum_{m=0}^{r-1} \alpha^r_m$, avec $\alpha^r_k = d^r_k / (\beta^r_k + \varepsilon)^p$, où ε est un paramètre choisi pour éviter la division par zero (il est pris égal à 10^{-10}), et $1 \leq p \leq \infty$ est une constante qui sert pour peser l'exclusion des stencils où les polynômes de Lagrange sont moins réguliers. Dans la suite, on retiendra la valeur $p = 2$. Les coefficient tendent α^r_k vers les valeurs optimales d^r_k, qui permettent d'aboutir à un schéma centré précis à l'ordre $2r-1$. Pour $r = 4$, ces coefficients valent $d^4_0 = 1/35$, $d^4_1 = 12/35$, $d^4_2 = 18/35$ et $d^4_3 = 4/35$. Les coefficients β^r_k sont des paramètres de régularité qui mesurent la continuité de la solution et leur expression analytique est donnée par :

$$\beta^r_k = \sum_{m=1}^{r-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2m-1} \left(\frac{\mathrm{d}^m \psi(x)}{\mathrm{d}x^m}\right)^2 \mathrm{d}x. \tag{3.10}$$

Il a été remarqué que la valeur couramment choisie pour ϵ diminue la précision des indicateurs de régularité. Shen et Zha [239], Rathan et Raju [222] ont alors proposé des indicateurs de régularité d'ordre supérieur ce qui permet d'obtenir un schéma `WENO7`-amélioré qui s'avère un peu plus précis que `WENO7`. À partir des indicateurs β^r_k précédents, on calcule :

$$\alpha^r_k = d^r_k \left(1 + \frac{\zeta}{(\beta^r_k + \varepsilon)^2}\right), \tag{3.11}$$

où ζ est l'indicateur global de régularité donné par $\zeta = |\beta^r_0 - \beta^r_3|^2$. Après le calcul des flux

caractéristiques numériques, $\hat{f}_{s,i+1/2} = \hat{f}^{+}_{s,i+1/2} + \hat{f}^{-}_{s,i+1/2}$, la reconstruction des flux numériques conservatifs se fait par une opération inverse, en multipliant (3.4) par la matrice de vecteurs propres à gauche $\boldsymbol{R}$:

$$\boldsymbol{R}\frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial t} + \boldsymbol{R}\frac{\partial \boldsymbol{F_s}}{\partial x} = \frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} = 0. \tag{3.12}$$

Dans ce travail, la version utilisée du schéma WENO7 est celle proposée dans la référence [239]. Afin de diminuer la viscosité numérique introduite par le décentrage des stencils issue de la pondération non linéaire, une stratégie hybride a été retenue. Dans les régions de l'écoulement où il n'y a pas de discontinuité, on utilise un schéma aux différences finies d'ordre élevé en lieu et place du schéma WENO7 lors de l'évaluation des flux numériques. Cette opération est équivalente à la superposition des quatre stencils candidats du schéma WENO7 lorsque chaque stencil est évalué avec son poids optimal d_k. La détermination des discontinuités dans les solutions est réalisée à partir de l'évaluation des gradients locaux normalisés de pression et de masse volumique. Quand, dans un point du domaine de calcul, ces deux gradients normalisés dépassent une certaine valeur, *e.g.*, 5%, la région incluant ce point est (i) définie par tous les autres points compris dans les différents stencils $S_k = (x_{i-k}, x_{i-k+1}, ..., x_{i-k+r-1})$ avec $k = 0, \ldots, r-1$, (ii) *marquée* comme une région discontinue. Ce critère, utilisé dans différentes configurations numériques avec présence des fortes discontinuités, a montré que la procédure d'interpolation du schéma WENO7 n'est appliquée que dans les régions englobant les discontinuités, tandis que dans le reste de l'écoulement le schéma du ENO7 est utilisé. Des différentes hybridations du schéma WENO avec des schémas centrés similaires à celle retenue dans ce travail peuvent être retrouvées dans la littérature [117, 213, 288].

3.1.2 Discrétisation spatiale des flux diffusifs

Les contributions moléculaires, incluant les termes visqueux et diffusifs du système (3.1), sont déterminées à l'aide d'un schéma centré d'ordre 8. Pour simplifier l'écriture des équations, nous ne considérons à nouveau que la première direction de l'espace ($\boldsymbol{G} \equiv \boldsymbol{G_1}$ et $x \equiv x_1$). Dans un domaine de calcul discrétisé régulièrement en N points, $x_i = i\Delta x$ pour $i = 1, \ldots, N$, avec Δx le pas de discrétisation spatiale, l'approximation d'ordre 8 de la dérivée est donnée par :

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left[a_8(\boldsymbol{G}_{i-4} - \boldsymbol{G}_{i+4}) + b_8(\boldsymbol{G}_{i-3} - \boldsymbol{G}_{i+3}) + c_8(\boldsymbol{G}_{i-2} - \boldsymbol{G}_{i+2}) + d_8(\boldsymbol{G}_{i-1} - \boldsymbol{G}_{i+1})\right], \tag{3.13}$$

avec $a_8 = -3/840$, $b_8 = 32/840$, $c_8 = -168/840$ et $d_8 = 672/840$. La précision numérique de la dérivée est progressivement diminuée à proximité des frontières physiques du domaine de calcul. Un schéma centré d'ordre 6 est employé aux points $i = 4$ et $i = N - 3$:

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left[a_6(\boldsymbol{G}_{i-3} - \boldsymbol{G}_{i+3}) + b_6(\boldsymbol{G}_{i-2} - \boldsymbol{G}_{i+2}) + c_6(\boldsymbol{G}_{i-1} - \boldsymbol{G}_{i+1})\right], \tag{3.14}$$

avec $a_6 = 1/60$, $b_6 = -9/60$ et $c_6 = 45/60$. Aux points $i = 3$ et $i = N - 2$, un schéma centré d'ordre 4 est utilisé :

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left[a_4(\boldsymbol{G}_{i-2} - \boldsymbol{G}_{i+2}) + b_4(\boldsymbol{G}_{i-1} - \boldsymbol{G}_{i+1})\right], \tag{3.15}$$

avec $a_4 = -1/12$ et $b_4 = 8/12$. Aux points $i = 2$ et $i = 1$, le même schéma d'ordre 4 est décentré. Pour $i = 2$, l'expression suivante est utilisée :

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left[a_{4l}\boldsymbol{G}_{i-1} + b_{4l}\boldsymbol{G}_i + c_{4l}\boldsymbol{G}_{i+1} + d_{4l}\boldsymbol{G}_{i+2} + e_{4l}\boldsymbol{G}_{i+3}\right], \tag{3.16}$$

avec $a_{4l} = -3/12$, $b_{4l} = -10/12$, $c_{4l} = 18/12$, $d_{4l} = -6/12$ et $e_{4l} = 1/12$. De la même manière, l'expression de la dérivée au point $i = 1$ est donnée par :

$$\frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} \approx \frac{1}{\Delta x}\left[a_{4u}\boldsymbol{G}_i + b_{4u}\boldsymbol{G}_{i+1} + c_{4u}\boldsymbol{G}_{i+2} + d_{4u}\boldsymbol{G}_{i+3} + e_{4u}\boldsymbol{G}_{i+4}\right], \tag{3.17}$$

avec $a_{4u} = -25/12$, $b_{4u} = 48/12$, $c_{4u} = -36/12$, $d_{4u} = 16/12$ et $e_{4u} = -3/12$. L'obtention des expressions des dérivées aux points $i = N - 1$ et $i = N$ se fait de manière symétrique par rapport aux points $i = 2$ et $i = 1$, respectivement.

La forme discrétisée des flux numériques convectifs et diffusifs présentée ci-dessus est obtenue sous l'hypothèse d'un domaine de calcul discrétisé régulièrement, *i.e.*, avec un pas de discrétisation spatiale constante. Néanmoins, il est possible d'utiliser les expressions précédentes avec des maillages cartésiens non uniformes, permettant de concentrer des points de calcul dans certaines régions d'intérêt. Dans ce cas, une simple transformation de l'opérateur de dérivée spatiale est appliquée. La dérivée d'une certaine quantité ϕ dans un domaine cartésien non uniforme composé de N points de calcul est donnée par :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi_i}\frac{\partial \xi_i}{\partial x_i}, \tag{3.18}$$

avec $\xi_i = i$ pour $i = 1, \ldots, N$ la nouvelle variable indépendante avec un pas de discrétisation constant, $\Delta\xi_i = 1$ pour $i = 1, \ldots, N$. L'expression $\partial\xi_i/\partial x_i$ est évaluée une seule fois dans le code de calcul à l'aide du schéma aux différences finies présenté dans cette section. Cette approche n'est valable que lorsque ϕ est une fonction continue de ξ. Dans la pratique, ceci se traduit par des taux d'étirement des mailles réguliers et modérés.

3.1.3 Intégration temporelle

Après avoir exposé les méthodes numériques utilisées pour la discrétisation spatiale du système (3.1), nous nous intéressons maintenant à la discrétisation temporelle de ce système. Cette discrétisation est soumise à deux contraintes :

- La première, relevant de la physique, implique que le pas de temps Δt soit plus petit que la plus petite échelle de temps diffusive, convective ou chimique (le pas limitant)

afin de capturer convenablement les phénomènes mis en jeu.

- La seconde, qui est une contrainte purement numérique, permet d'assurer la stabilité du schéma d'intégration utilisé pour l'avancement en temps de la résolution des équations de Navier-Stokes.

Les écoulements réactifs qui sont considérés dans ce travail peuvent présenter des termes sources chimiques très raides. Ainsi, le temps caractéristique réactif peut être très faible par rapport aux temps caractéristique convectif et diffusif. Pour pallier aux deux contraintes, la stratégie adoptée utilise la méthode *Splitting de Strang* [82, 250]. Dans cette méthode explicite, après l'intégration de la partie inerte des équations du mouvement (termes convectifs et diffusifs), il est nécessaire de résoudre un ensemble d'équations différentielles ordinaires concernant la partie réactive. L'intégration de ces équations nécessite la connaissance des conditions initiales, qui sont les solutions obtenues après la résolution de la partie inerte des équations du mouvement. La mise à jour de la solution après un temps Δt donnée par la méthode de *Strang* s'écrit comme :

$$\boldsymbol{Q}^{n+1} = [\mathfrak{L}_r(\Delta t/2)\mathfrak{L}_i(\Delta t)\mathfrak{L}_r(\Delta t/2)]\,\boldsymbol{Q}^n, \tag{3.19}$$

où $\mathfrak{L}_r$ et $\mathfrak{L}_i$ sont les opérateurs discrets correspondant à l'intégration du terme réactif et inerte, respectivement. L'opérateur d'intégration des termes inertes s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} = \mathfrak{L}_i(\boldsymbol{Q}(t)) = -\frac{\partial F_j}{\partial x_j} + \frac{\partial G_j}{\partial x_j}. \tag{3.20}$$

L'intégration des équations précédentes s'effectue à l'aide d'un schéma TVD (*total variation diminishing*) Runge-Kutta précis à l'ordre 3 [99]. L'avancement en temps du système (3.20) se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{Q}^{(1)} &= \boldsymbol{Q}^n + \Delta t\mathfrak{L}_i(\boldsymbol{Q}^n),\\
\boldsymbol{Q}^{(2)} &= \frac{1}{4}\left[3\boldsymbol{Q}^n + \boldsymbol{Q}^{(1)} + \Delta t\mathfrak{L}_i(\boldsymbol{Q}^{(1)})\right],\\
\boldsymbol{Q}^{n+1} &= \frac{1}{3}\left[\boldsymbol{Q}^n + 2\boldsymbol{Q}^{(2)} + 2\Delta t\mathfrak{L}_i(\boldsymbol{Q}^{(2)})\right],
\end{aligned} \tag{3.21}$$

où $\boldsymbol{Q}^n$ est la valeur du vecteur de variables conservatives à l'instant n tandis que $\boldsymbol{Q}^{(1)}$ et $Q^{(2)}$ sont des solutions intermédiaires. La solution de ce système à l'instant $n+1$ peut s'écrire comme :

$$\boldsymbol{Q}^{n+1} = [\mathfrak{L}_i(\Delta t)]\boldsymbol{Q}^n. \tag{3.22}$$

L'intégration temporelle des termes sources chimiques est effectuée avec le solveur `CVODE` que nous avons couplé avec le solveur `CREAMS`. Ce couplage nous a également conduit à réécrire la librairie `CHEMKIN` en Fortran 90 pour une meilleure gestion des différentes variables. L'annexe §C rassemble quelques éléments utiles quant au fonctionnement de la librairie `CVODE`.

La résolution du système (3.22) à l'instant $n+1$, doit assurer la conservation de la masse du système : $\sum_{\alpha=1}^{N}\dot{\omega}_\alpha = 0$. Pour ce faire, la fraction massique de l'espèce majoritaire est recalculée à partir de la contribution des autres espèces $Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}-1} Y_\alpha$. En outre, un

double critère a été mis au point par Martinez-Ferrer [182] afin de déterminer les régions *suffisamment* réactives où l'intégration du système (3.22) est effectuée. Ainsi, les régions composées exclusivement d'oxydant pur ou de combustible pur où le terme de production minimum d'une espèce, $\dot{\omega}_\alpha$, est inférieur à $10^{-12}\,\mathrm{s}^{-1}$ ne sont pas prises en compte par ce critère. Cette méthode permet d'économiser d'importantes ressources de calcul car elle permet d'évaluer (3.22) seulement dans les régions susceptibles de réagir.

Finalement, la solution du système complet s'obtient par application de la méthode *splitting de Strang* (3.19) :

étape 1 : résolution du système (3.22) à partir des données initiales avec un pas de temps $\Delta t/2$;

étape 2 : résolution du système (3.20) à partir de la solution obtenue dans l'**étape 1** avec un pas de temps Δt ;

étape 3 : résolution du système (3.22) à partir de la solution obtenue dans l'**étape 2** avec un pas de temps $\Delta t/2$.

3.1.4 Critères de stabilité numérique

Le solveur développé étant explicite, la restriction sur les pas de temps liée à la partie convective est assurée par le critère CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) défini comme :

$$\mathtt{CFL} = \max\left[\left(\sqrt{u_i u_i} + c\right)\frac{\Delta t}{\Delta x_i}\right], \tag{3.23}$$

avec une valeur maximale fixée dans notre cas à $\mathtt{CFL} \lesssim 0.9$, tandis que la restriction associée à la partie visqueuse est assurée par le nombre de Fourier, Fo, définit comme :

$$\mathrm{Fo} = \max\left[D_{m,\alpha}\frac{\Delta t}{\Delta {x_i}^2}, \frac{\lambda \Delta t}{\rho c_p \Delta {x_i}^2}\right], \tag{3.24}$$

avec $\mathrm{Fo} \lesssim 0.1$. Malgré le fait que le schéma utilisé pour l'intégration des termes sources chimiques soit stable, un critère basé sur la chimie est appliqué à chaque itération. Ce critère additionnel permet de réduire le pas de discrétisation temporel pour capturer l'évolution de la composition de certaines espèces chimiques dont le temps caractéristique est inférieur au pas de temps imposé par les processus convectifs et diffusifs. Ce critère est très utile dans des processus transitoires ou d'auto-inflammation et est détaillé dans la thèse de Martinez-Ferrer [182].

3.1.5 Température du mélange

Comme indiqué dans la section 2.3.3, la dépendance non linéaire avec la température des chaleurs spécifiques à pression constante empêche le calcul direct de cette quantité. La valeur

de la température du mélange est obtenue par la racine de

$$f(T) = e_t + \frac{RT}{W} - h(T) - \frac{u_i u_i}{2}. \tag{3.25}$$

La dérivée de cette fonction par rapport à la température donne

$$f'(T) = \frac{\mathrm{d}f(T)}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{\gamma(T) - 1}, \tag{3.26}$$

qui est une fonction décroisante de la température. L'équation (3.25) peut être résolue avec la méthode itérative de Newton-Raphson [7]

$$T^{n+1} = T^n - \frac{f(T^n)}{f'(T^n)}. \tag{3.27}$$

L'initialisation de cette procédure itérative T^1 est la température initiale, supposée connue. Dans la plupart des applications considérées ensuite, un nombre d'itérations inférieur à 5 suffit pour obtenir la convergence du calcul de la température. Cette convergence est atteinte lorsque, pour chaque point du maillage, la relation $|T^{n+1} - T^n| < 10^{-6}\,\mathrm{K}$ est vérifiée. Dans le code de calcul développé, cet algorithme est optimisé de façon à évaluer simultanément la température et la chaleur spécifique à pression constante du mélange ainsi que les enthalpies de toutes les espèces.

3.2 Conditions aux limites non-réfléchissantes et absorbantes

Dans cette section, on présentera les conditions aux limites non-réfléchissantes et absorbantes qui sont utiles pour l'étude numérique d'un certain nombre de problème tel que l'interaction choc-turbulence.

3.2.1 Conditions aux limites non-réfléchissantes

Pour des écoulements compressibles, les grandeurs physiques (vitesses, pression, température) au bord du domaine ne peuvent pas être fixées, car cela entraînerait une dérive des grandeurs calculées ainsi que la réflexion d'ondes parasites à l'intérieur du domaine de calcul. La méthode des caractéristiques appelée NSCBC pour *Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions* permet de spécifier les conditions aux limites pour des systèmes hyperboliques en analysant les différentes ondes traversant une frontière. Elles permettent par exemple dans le cas d'une condition non-réfléchissante d'absorber la majorité des ondes acoustiques tout en évitant la réflexion d'ondes parasites. Introduite par Thompson [254] pour des écoulements non visqueux, les conditions limites caractéristiques (notées ECBC pour *Euler Characteristic Boundary conditions*) ont été généralisées aux équations de Navier-Stokes par Poinsot et Lele [215]. Ces développements ont ensuite été étendus par Baum *et al.* [14] aux

écoulements multi-espèces, pour permettre l'étude des écoulements réactifs. Ces conditions reposent sur l'hypothèse que l'écoulement à la frontière est localement monodimensionnel. Les différentes amplitudes des ondes franchissant la frontière sont alors déterminées à l'aide du système `LODI` (*Local One Dimensional Inviscid*). Ces relations sont issues des équations de Navier-Stokes écrites pour les variables primitives sous formes caractéristiques. Plus récemment, Yoo *et al.* [283] ont ajouté la prise en compte des termes transversaux dans le traitement de la conditions aux limites, termes jusque là négligés. Enfin, Lodato *et al.* [168] ont étendu ces conditions avec la prise en compte des effets de convection et de gradient de pression dans le plan de sortie.

Méthodes des ondes caractéristiques : dans un soucis de concision, nous nous limitons ici à la définition des ondes sur la frontière de sortie $x_1 = L$. Comme la notion de caractéristiques est liée à la partie convective des équations de Navier-Stokes, ces dernières s'écrivent sous la forme suivante faisant intervenir la variable conservée du problème $\boldsymbol{Q} = (\rho, \rho u_1, \rho e_t, \rho Y_1, \ldots, \rho Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}})^t$:

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x_1} = \boldsymbol{D}, \tag{3.28}$$

Les dérivées suivant x_2 et x_3 sont regroupées dans le terme de droite $\boldsymbol{D}$. La première étape consiste à récrire le système précédent en utilisant les variables primitives :

$$\boldsymbol{Q}_p = (\rho, u_1, u_2, u_3, e_t, Y_1, \ldots, Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}})^t,$$

à l'aide des matrices $\boldsymbol{P}$ et $\boldsymbol{Q}$:

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}_p}{\partial t} + \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}\frac{\partial \boldsymbol{Q}_p}{\partial x_1} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}. \tag{3.29}$$

La matrice $A = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}$ est diagonalisable et ses valeurs propres sont données par :

$$\begin{cases} \lambda_1 = u_1 - c, \\ \lambda_2 = u_1, \\ \lambda_3 = u_1, \\ \lambda_4 = u_1, \\ \lambda_5 = u_1 + c, \\ \lambda_{5+k} = u_1. \end{cases} \tag{3.30}$$

La matrice associée $\boldsymbol{\mathcal{A}}$ de $\boldsymbol{A}$ vérifie $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{\mathcal{A}}\boldsymbol{S}$, où les lignes de la matrice $\boldsymbol{S}$ sont formées par les vecteurs propres de la matrice $\boldsymbol{A}$. Le système (3.29) devient alors :

$$\boldsymbol{S}\frac{\partial \boldsymbol{Q}_p}{\partial t} + \boldsymbol{\mathcal{A}}\boldsymbol{S}\frac{\partial \boldsymbol{Q}_p}{\partial x_1} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}. \tag{3.31}$$

En ignorant les dérivées dans les directions transverses $\boldsymbol{S}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}$, l'équation (3.31) correspond à un système d'équations caractéristiques pour la variable vectorielle $d\boldsymbol{\mathcal{U}}_p = \boldsymbol{S}d\boldsymbol{Q}_p$. Ce vecteur $d\boldsymbol{\mathcal{U}}_p$ regroupe les invariants associés aux perturbations entropiques $d\mathcal{U}_{p,2}$, tourbillonnaires (composantes tangentielles de vitesse) ($d\mathcal{U}_{p,3}$ et $d\mathcal{U}_{p,4}$), acoustique progressive ($d\mathcal{U}_{p,5}$) et acoustique rétrograde ($d\mathcal{U}_{p,1}$). Selon le signe des valeurs propres, on est capable de connaître le sens de propagation de l'une de ces ondes élémentaires suivant la direction considérée. Pour un écoulement se déplaçant suivant la direction des x_1 croissants, la vitesse u_1 est positive ($u_1 > 0$). Seule la valeur propre λ_1 peut alors être négative si $c > u_1$, i.e. si l'écoulement est subsonique ($M = u_1/c < 1$). Lors du développement de conditions aux limites non-réfléchissantes, Thompson [254] introduit le vecteur $\boldsymbol{\mathcal{L}}$ qui correspond aux variations temporelles des amplitudes des ondes caractéristiques :

$$\boldsymbol{\mathcal{L}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} - \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \\ \lambda_2 \left(c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial P}{\partial x_1} \right) \\ \lambda_3 \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \\ \lambda_4 \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \lambda_5 \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} + \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \\ \lambda_{5+k} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial x_1} \right) \end{bmatrix} \tag{3.32}$$

Cette décomposition va être utilisée afin d'imposer la non-réflexion des ondes sur une des limites du domaine de calcul.

Méthodes de calcul : la méthode proposée par Poinsot et Lele [215] consiste à modifier le système d'équations de Navier-Stokes au niveau des limites du domaine de calcul en utilisant une décomposition du terme convectif sur les caractéristiques. Ainsi, en prenant l'exemple d'une condition aux limites s'appliquant sur une surface plane normale à la direction x_1, le système modifié d'équations s'écrit :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 + \dfrac{\partial m_2}{\partial x_2} + \dfrac{\partial m_3}{\partial x_3} = 0, & (3.33a) \\ \dfrac{\partial m_1}{\partial t} + u_1 d_1 + \rho d_3 + \dfrac{\partial m_1 u_2}{\partial x_2} + \dfrac{\partial m_1 u_3}{\partial x_3} = \dfrac{\partial \tau_{1j}}{\partial x_j}, & (3.33b) \\ \dfrac{\partial m_2}{\partial t} + u_2 d_1 + \rho d_4 + \dfrac{\partial m_2 u_2}{\partial x_2} + \dfrac{\partial m_2 u_3}{\partial x_3} = \dfrac{\partial \tau_{2j}}{\partial x_j}, & (3.33c) \\ \dfrac{\partial m_3}{\partial t} + u_3 d_1 + \rho d_5 + \dfrac{\partial m_3 u_2}{\partial x_2} + \dfrac{\partial m_3 u_3}{\partial x_3} = \dfrac{\partial \tau_{3j}}{\partial x_j}, & (3.33d) \\ \dfrac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + Y_k d_1 + \rho d_{5+k} + \dfrac{\partial (m_2 Y_k)}{\partial x_2} + \dfrac{\partial (m_3 Y_k)}{\partial x_3} = \dfrac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \dfrac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) - \dot{\omega}_k & (3.33e) \end{cases}$$

pour $k = 1, \cdots, \mathcal{N}_{\text{sp}}$ et $m_i = \rho u_i$. Il est complété par l'équation d'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{2}\left(\sum_{k=1}^{3} u_k^2\right) d_1 + \frac{d_2}{\gamma - 1} + m_1 d_3 + m_2 d_4 + m_3 d_5 + \\ \frac{\partial}{\partial x_2}\left[u_2\left(\rho e_s + P\right)\right] + \frac{\partial}{\partial x_3}\left[u_3\left(\rho e_s + P\right)\right] = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(u_i \tau_{ij}\right). \end{aligned} \tag{3.34}$$

Cette écriture introduit les composantes du vecteur $\boldsymbol{d}$:

$$\boldsymbol{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \\ d_{5+k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{c^2}\left(\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1)\right) \\ \frac{1}{2}\left(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1\right) \\ \frac{1}{2\rho c}\left(\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1\right) \\ \mathcal{L}_3 \\ \mathcal{L}_4 \\ \mathcal{L}_{5+k} \end{bmatrix} \tag{3.35}$$

Le système `LODI` : ce système est déduit du nouveau système d'équation de Navier-Stokes modifié. Les termes perpendiculaires à la frontière ainsi que les termes visqueux sont négligés, ce qui conduit au système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{1}{c^2}\left[\mathcal{L}_2 + \dfrac{1}{2}\left(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_5\right)\right] = 0, & (3.36a) \\ \dfrac{\partial p}{\partial t} + \dfrac{1}{2}\left(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_5\right) = 0, & (3.36b) \\ \dfrac{\partial u_1}{\partial t} + \dfrac{1}{2\rho c}\left(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_5\right) = 0, & (3.36c) \\ \dfrac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 = 0, & (3.36d) \\ \dfrac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 = 0, & (3.36e) \\ \dfrac{\partial Y_k}{\partial t} + \mathcal{L}_{5+k} = 0. & (3.36f) \end{cases}$$

Condition de sortie partiellement non réfléchissante : dans le cas d'une sortie subsonique, il y a une seule onde caractéristique entrant dans le domaine de calcul. Pour obtenir une condition limite purement non réfléchissante, il suffit de forcer l'amplitude de cette onde à zéro. Cependant, cette méthode induit une dérive des grandeurs physiques au cours du temps. Afin de palier à ce problème de dérive, Poinsot et Lele [215] suggère de fixer l'amplitude de cette onde en fonction de la différence de pression entre la sortie et l'infini (3.37) :

$$\mathfrak{L}_1 = \mathfrak{Q}\left(p - p_\infty\right). \tag{3.37}$$

Rudy et Strikwerda [229] ont défini le paramètre $\mathfrak{Q}$ par $\mathfrak{Q} = \sigma\left(1 - M^2\right) c / L$, où σ représente une constante comprise entre 0 et 1, M le Mach maximum dans l'écoulement, c la vitesse du son et L une longueur caractéristique du domaine de calcul. Lorsque $\mathfrak{Q} = 0$, l'amplitude de

l'onde $\mathfrak{L}_1$ est imposée à 0, ce qui rend la condition parfaitement non-réfléchissante. Lorsque la pression à la frontière est proche de la pression à l'infini, l'amplitude $\mathfrak{L}_1$ est également proche de 0. La frontière est alors non réfléchissante. Au contraire, si l'écart entre les pressions est important, des ondes vont être réfléchies à l'intérieur du domaine pour rétablir la pression à l'infini.

3.2.2 Conditions aux limites absorbantes

L'utilisation de conditions aux limites absorbantes telles que nous les avons implémentées revient à ajouter une zone de calcul supplémentaire qui permet d'éliminer les fluctuations de l'écoulement. On définit alors l'épaisseur de cette zone absorbante par L_{ep}. Un paramètre l permet de définir la distance entre un point de la zone absorbante et la limite du domaine de calcul. Des conditions aux limites de type NSCBC sont utilisées en sortie de cette zone absorbante afin de limiter la production de perturbations. Il est donc nécessaire d'étendre le domaine de simulation qui comprend maintenant le domaine de calcul et les zones absorbantes. Le nombre de points supplémentaires N_a doit donc rester relativement faible afin de ne pas augmenter le coût de calcul de manière rédhibitoire. L'élimination des perturbations est basée sur le forçage de l'écoulement vers un écoulement de référence. Cette méthode suppose donc la connaissance d'un écoulement de référence. Cette approche permet aussi de maintenir l'écoulement dans un état déterminé. Le forçage de l'écoulement est basé sur la modification du système d'équations dans les zones absorbantes de la manière suivante :

$$\frac{\partial \boldsymbol{Q}}{\partial t} = -\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial x} + \frac{\partial \boldsymbol{G}}{\partial x} + \boldsymbol{S} - \underbrace{\sigma\left(\boldsymbol{Q} - \boldsymbol{Q}_{\text{ref}}\right)}_{\text{Terme de forçage}}. \tag{3.38}$$

Le terme de forçage fait intervenir un paramètre d'amortissement σ et l'écoulement de référence $\boldsymbol{Q}_{\text{ref}}$ vers lequel on fait tendre la solution. Le paramètre σ évolue en fonction du paramètre l qui représente la distance entre le point courant à l'intérieur de la zone absorbante et la limite du domaine de calcul. Plus l augmente, plus le terme de forçage devient prépondérant. Le forçage reste actif tant que la solution courante $\boldsymbol{Q}$ est différente de la solution $\boldsymbol{Q}_{\text{ref}}$. Ce type de condition a déjà été utilisé avec succès par Mahesh *et al.* [173] qui ont retenu l'expression $\sigma = \sigma_m (l/L_{\text{ep}})^n$, où n définit le degré de la loi puissance du forçage et σ_m le paramètre qui règle l'intensité maximale du forçage. Pour Mahesh *et al.* [173], ce paramètre σ_m est une constante fixée avant de conduire le calcul. L'utilisateur modifie cette valeur en fonction de l'écoulement simulé.

3.2.3 Relations de Rankine-Hugoniot

Soit une onde de choc oblique stationnaire, que l'on peut rencontrer dans un écoulement où une rampe de compression est présente et faisant un angle θ par rapport à la direction principale de l'écoulement. On suppose ici que l'écoulement est permanent, les forces vo-

lumiques sont négligées et le fluide est parfait (viscosité et conductivité thermique nulle). Il suit la loi d'état des gaz parfaits. L'écoulement est aussi supposé *inerte*, de sorte que la composition du mélange de part et autre du choc reste identique.

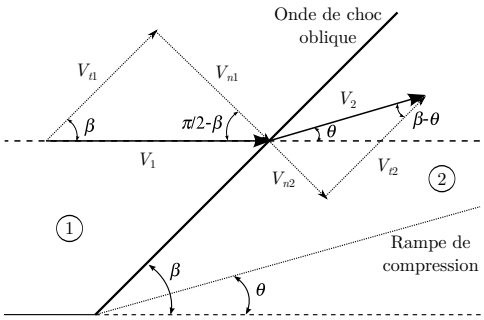


Figure 3.2. *Schéma d'une onde de choc oblique stationnaire*

La Figure 3.2 montre par exemple un écoulement qui se propage de la gauche, avec une vitesse V_1, vers la droite, avec une vitesse V_2 et est défléchi d'un angle θ en aval du choc ; V_{ni} et V_{ti} sont les vitesses normales et tangentielles respectivement, avec $i = 2$ en amont et $i = 1$ en aval du choc, respectivement.

Les relations de Rankine-Hugoniot (3.39a)-(3.39e) [43] permettent de calculer les états en aval du choc. Ces relations proviennent de l'équation d'état (3.39a) supposant le mélange homogène en amont et en aval du choc ; de continuité (3.39b) et (3.39c) ; de quantité de mouvement (3.39d) et d'énergie (3.39e) ; avec les relations suivantes : $V_{n1} = V_1 \sin\beta$, $V_{n2} = V_2 \sin(\beta - \theta)$ et $\theta = \beta - \arctan(V_{n2} \tan\beta / V_{n1})$ où β est l'angle du choc par rapport à la direction initiale de l'écoulement.

$$\begin{cases} P_1/\rho_1 T_1 = P_2/\rho_2 T_2, & (3.39a) \\ V_{t1} = V_{t2}, & (3.39b) \\ \rho_1 V_{n1} = \rho_2 V_{n2}, & (3.39c) \\ P_1 + \rho_1 V_{n1}^2 = P_2 + \rho_2 V_{n2}^2, & (3.39d) \\ h_1 + V_{n1}^2/2 = h_2 + V_{n2}^2/2. & (3.39e) \end{cases}$$

Étant donné que seule la composante normale au choc apparaît dans ce système, nous simplifierons la notation en prenant : $V_{n1} = u_1$ et $V_{n2} = u_2$. Enfin pour résoudre ce système, la méthode consiste à se ramener à une équation non linéaire (Mitchell et Kee [189]) en réécrivant l'équation (3.39e) et ainsi trouver le zéro ce cette fonction afin d'obtenir :

$$f(\phi) = h_1(T_1) - h_2(T_2) + \frac{u_1^2}{2}\left(1 - \frac{\phi^2}{\psi(\phi)^2}\right), \tag{3.40}$$

car $u_2/u_1 = \rho_1/\rho_2 = (T_2/T_1)/(P_2/P_1)$, *via* (3.39a) et (3.39b), et en posant $\phi = T_2/T_1$ et $\psi = P_2/P_1$. Le rapport $\psi(\phi) = P_2/P_1$ s'obtient en divisant (3.39c) par p_1, ce qui conduit à une

équation du second degré :

$$\psi^2 - \left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}\right)\psi + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}\phi = 0, \tag{3.41}$$

dont la solution n'existe que si son discriminant est positif ou nul. De plus, la seule solution physiquement correcte à (3.41) est celle où l'on ajoute la racine de son discriminant, sinon T_2/T_1 serait inférieur à l'unité. Par conséquent, le rapport de pression ψ s'exprime par :

$$\psi(\phi) = \frac{P_2}{P_1} = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}\right) + \sqrt{\left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}\right)^2 - 4\phi\frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}}\right], \tag{3.42}$$

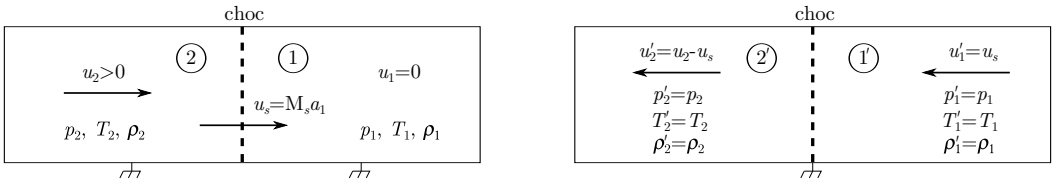
et la positivité du discriminant implique que

$$\phi \leq \left(1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{P_1}\right)^2 \frac{P_1}{4\rho_1 u_1^2}. \tag{3.43}$$

Finalement, pour trouver le zéro de f, la méthode de Newton-Raphson [7] est utilisée avec une estimation numérique de la dérivée. Si cette dernière échoue, par exemple lorsque la condition (3.43) n'est pas vérifiée, une méthode de dichotomie est utilisée. Ces méthodes sont stables et convergentes car la fonction f est strictement monotone et contient un seul zéro sur l'intervalle $[1, \phi_{max}]$ avec $\phi_{max} = \left(1 + \rho_1 u_1^2/P_1\right)^2 P_1/4\rho_1 u_1^2$.

Cas d'un choc instationnaire

Soit un choc se déplaçant à une vitesse $u_s = M_s a_1$ connue, dans un milieu au repos (état 1) lui aussi connu (cf. Figure 3.3(a)), ce choc génère une vitesse et des états thermodynamiques induits qu'il reste à déterminer. Pour cela, la méthode (Mitchell et Kee [189]) consiste à changer de repère en se plaçant dans le cas d'un choc stationnaire (cf. Figure 3.3(b)) afin que les relations de Rankine-Hugoniot (3.39a)-(3.39e) puissent être utilisées. Les états thermodynamiques entre (2) et (2′) étant identiques, la vitesse induite en aval du choc est alors déterminée par $u_2 = u_s - u_2'$.



(a) Repère du laboratoire : choc instationnaire (b) Repère du choc : choc stationnaire

Figure 3.3. *Méthode de calcul pour déterminer les conditions post-choc (état 2) d'une onde de choc instationnaire*

3.3 Cas tests numériques

3.3.1 Problèmes de Riemann bidimensionnels

Nous commençons par valider les méthodes numériques développées sur des problèmes de Riemann bidimensionnels proposés par Lax et Liu [154]. Ces cas tests permettant de vérifier le bon calcul des chocs forts et d'évaluer la capacité à préserver la propagation d'ondes selon un faisceau continu de directions différentes en utilisant les équations d'Euler. La configuration physique correspondante partage le domaine de calcul $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ en quatre zones par les droites d'équations $x_1 = 1/2$ et $x_2 = 1/2$. Nous identifions ces zones selon leur position (nord-ouest, sud-est,. . .) par les lettres NO, NE, SE, SO. Pour le problème noté $\mathtt{RP}_4$, les conditions initiales utilisées vérifient :

$$(\rho, u_1, u_2, P) = \begin{cases} (1.1,\ 0,\ 0,\ 1.1), & \text{si SO} \\ (0.5065,\ 0.8939,\ 0,\ 0.35), & \text{si SE} \\ (1.1,\ 0.8939,\ 0.8939,\ 1.1), & \text{si NE} \\ (0.5065,\ 0,\ 0.8939,\ 0.35), & \text{si NO} \end{cases} \tag{3.44}$$

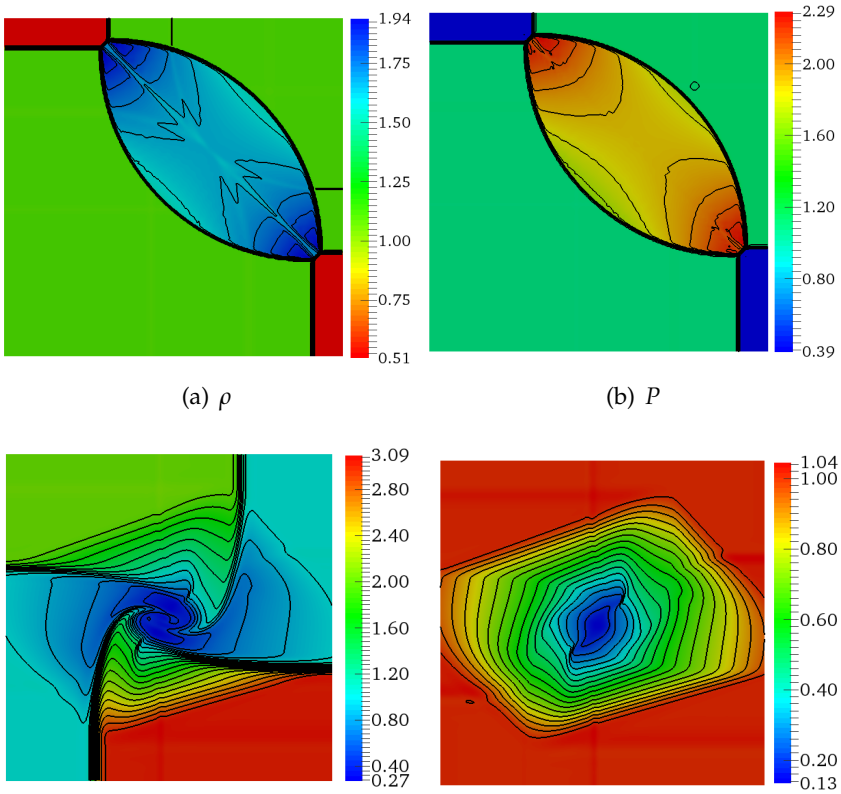
et, pour le second problème noté $\mathtt{RP}_6$:

$$(\rho, u_1, u_2, P) = \begin{cases} (1,\ 0.75,\ -0.5,\ 1), & \text{si SO} \\ (2,\ 0.75,\ 0.5,\ 1), & \text{si SE} \\ (1,\ -0.75,\ 0.5,\ 1), & \text{si NE} \\ (3,\ -0.75,\ 0.5,\ 1), & \text{si NO} \end{cases} \tag{3.45}$$

Pour les deux cas, des conditions de bord de type Neumann sont utilisées. Le temps final des deux simulations est $t_f = 0.25$s. Les résultats obtenus pour le champ de masse volumique sont présentés sur la Figure 3.4 avec 20 iso-contours uniformément espacés entre les valeurs extrêmes. Les résultats sont en accord avec ceux obtenus avec d'autres techniques de discrétisation [67, 50, 154, 149] et les différents fronts d'ondes courbes (chocs et discontinuités de contact) sont correctement restitués.

3.3.2 Tube à choc inerte multi-espèces

Ce cas test est une version modifiée du tube à choc 1D de Sod [243], proposé par Fedkiw *et al.* [81]. Ce cas test permet de vérifier d'une part le couplage entre les termes convectifs des équations de Navier-Stokes et la bibliothèque thermodynamique des mélanges multi-espèces, et d'autre part, la robustesse du schéma WENO7, en présence d'importantes discontinuités dans le milieu. On considère ici un tube de 10 cm de longueur qu'on maille régulièrement avec $N_{x_1} = 400$ points. Le mélange gazeux est composé de H_2, O_2 et Ar dont les fractions molaires respectives sont de 0.2, 0.1 et 0.7 ; ce mélange est au repos et est réparti de manière uniforme



(a) ρ (b) P

(c) ρ (d) P

Figure 3.4. *Champs de masse volumique et de pression superposés à 20 iso-contours de masse volumique et de pression. (a) et (b) pour la configuration* RP_4 *; (c) et (d) pour la configuration* RP_6*. Les deux simulations sont réalisées sur un maillage* $N_{x_1} \times N_{x_2} = 200 \times 200$*.*

dans le tube. Les conditions initiales correspondent au problème de Riemann suivant :

$$\text{à t=0} \begin{cases} (T_L, P_L) & = (400 \text{ K}, 8000 \text{ Pa}), \quad \text{si } x < 0.5 \text{ cm} \\ (T_R, P_R) & = (1200 \text{ K}, 80000 \text{ Pa}), \quad \text{sinon} \end{cases} \tag{3.46}$$

avec des conditions aux limites d'extrapolation imposées aux extrémités du tube. La simulation se fera jusqu'à un temps physique de 40 μs avec un CFL $= 0.5$. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 3.5 et montrent que les positions respectives du choc, de la discontinuité de contact ainsi que de la détente coïncident bien avec celles obtenues dans les travaux numériques de Fedkiw *et al.* [81]. Cependant, de faibles oscillations présentes au niveau de la discontinuité de contact apparaissent du fait que le schéma WENO7 ne s'est pas activé à cause d'une variation de pression et de masse volumique trop faible. Par conséquent le schéma centré est conservé, ce qui engendre ces instabilités numériques. Par ailleurs, étant donné que le code CREAMS tient compte des variations des grandeurs physico-chimiques avec la température, le profil de $\gamma = c_p/c_v$ met en évidence que l'hypothèse de γ constant, retenue par de nombreux auteurs, est incorrecte.

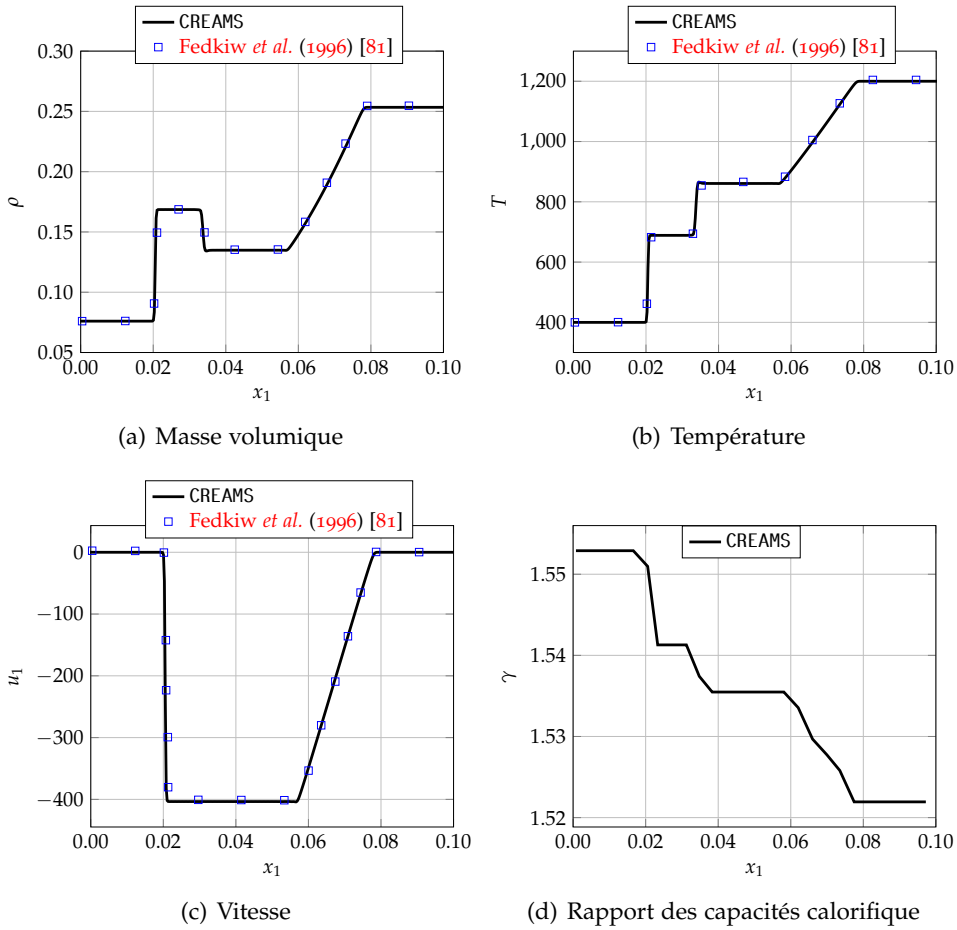


Figure 3.5. *Profils de (a) masse volumique, (b) température,(c) vitesse et (d) rapport des capacités calorifique du mélange pour le tube à choc multi-espèces inerte à $t = 40$ µs (abscisse = coordonnées x_1 en m)*

3.3.3 Flamme laminaire pré-mélangée d'hydrogène et oxygène

Afin de valider l'implémentation du solveur chimique CVODE intégré dans le solveur CREAMS dans le cadre de nos travaux, nous avons comparé la solution obtenue avec ce dernier avec la solution de référence obtenue avec la libraire CANTERA. En suivant les références [269, 288], l'étude de la combustion d'un mélange pauvre d'hydrogène-oxygène de richesse $\phi = 0.6$ a été réalisée. Le schéma cinétique utilisé est celui de Ó Conaire *et al.* [198]. Ce mécanisme réactionnel comporte 10 espèces chimiques et 21 étapes réactionnelles élémentaires. La température et la pression des gaz frais sont 298K et 1atm, respectivement. Le domaine de calcul monodimensionnel de 3cm de longueur est uniformément discrétisé avec une taille de maille de 15 μm, ce qui assure un degré de résolution compatible avec l'épaisseur caractéristique de flamme laminaire. La solution obtenue avec CANTERA est fournie comme condition initiale au solveur CREAMS. Une condition de type Dirichlet est imposée du côté gaz frais, en fixant la valeur de la température, la pression, la vitesse et la composition du mélange. Du côté des gaz brûlés, les gradients de fraction massique et de température sont annulés et la pression est fixée [140]. Dans la solution de CANTERA, la pression est supposée

constante dans tout le domaine. Cependant, pour la solution obtenue par CREAMS, elle varie légèrement à travers la flamme et il existe une période d'adaptation de la solution initiale due à l'ajustement de la pression [288]. Les valeurs CFL $= 0.9$, Fo=0.1, $\Delta T_{\max} = 15$K et $t_f = 3$ ms sont retenues pour la simulation.

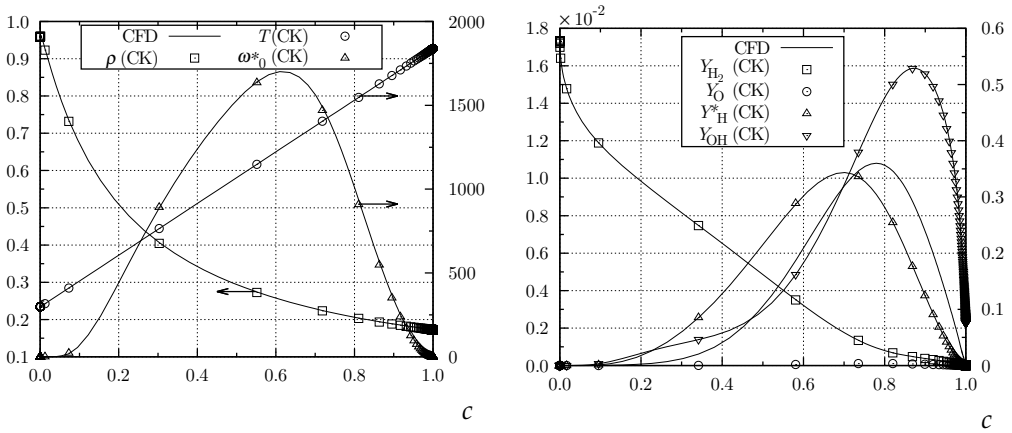


Figure 3.6. *Flamme laminaire de prémélange d'hydrogène-oxygène. Comparaison entre les solutions obtenues avec CANTERA (symboles) et le solveur CREAMS pour T, ρ et $\dot{\omega}_0$ (gauche) et les espèces majoritaires (droite). Les quantités sont tracées en fonction de la variable de progrès $c = (T - T_f)/(T_b - T_f)$ avec CFL $= 0.9$, $Fo = 0.1$ et $\dot{\omega}_0^* = 10^7 \dot{\omega}_0$*

La Figure 3.6 illustre les variables d'intérêt obtenues avec les solveurs CREAMS et CANTERA. Toutes les quantités sont tracées en unités SI, en fonction de la variable de progrès définie comme $c = (T - T_f)/(T_b - T_f)$, avec T_f la température des gaz frais et T_b la température des gaz brûlés. La Figure 3.6 montre que la solution CREAMS calculée avec les coefficients de transport détaillé est en très bon accord avec celle de référence obtenue avec la librairie CANTERA.

3.3.4 Transport d'un vortex

Dans le but de tester la validité des conditions aux limites de type NSCBC, le transport d'un tourbillon franchissant la frontière du domaine de calcul a été choisi. Cette configuration a été retenu par Lodato *et al.* [168] pour comparer une condition NSCBC simple avec son extension 3D-NSCBC. Ce type de structure est représentatif de celles rencontrées dans des écoulements turbulents. La description de l'écoulement se fait de la manière suivante. Un écoulement de base aux conditions uniformes P_∞, T_∞, $u_{1,\infty}$, et $u_{2,\infty}$ transporte un vortex isentropique décrit par les équations :

$$\frac{u_1'}{U_\infty} = -\beta \frac{x_2 - x_{2,c}}{R} e^{-\frac{r^2}{2R^2}}, \quad \frac{u_2'}{U_\infty} = +\beta \frac{x_1 - x_{1,c}}{R} e^{-\frac{r^2}{2R^2}}, \quad T' = -\frac{(\beta U_\infty)^2}{2c_p} e^{-\frac{r^2}{R^2}}, \tag{3.47}$$

où R représente le rayon du vortex, $(x_{1,c}, x_{2,c})$ les coordonnées de son centre, β son intensité. Les grandeurs r et U_∞ sont définies comme suit :

$$r = \sqrt{(x_1 - x_{1,c})^2 + (x_2 - x_{2,c})^2}, \quad U_\infty = \sqrt{u_{1,\infty}^2 + u_{2,\infty}^2}. \tag{3.48}$$

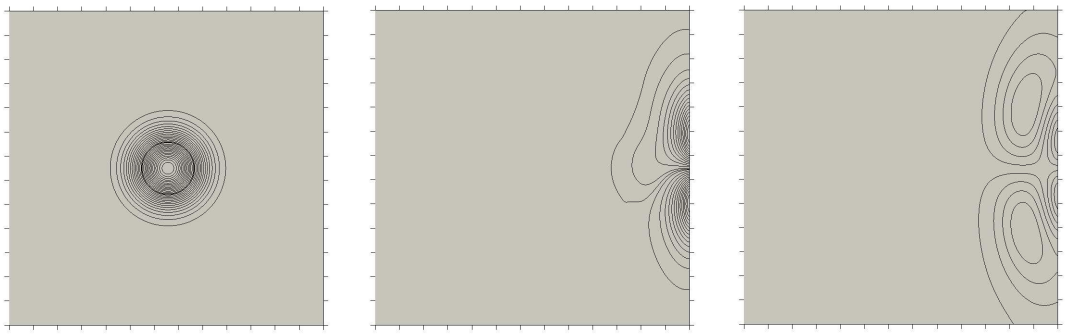
Dans ce calcul, les valeurs de R et β sont 0.00013 m et $5 \cdot 10^{-3}$, respectivement. Le champ complet résultant (P, T, u_1, v_1) est ensuite obtenu par superposition des perturbations :

$$u_1 = u_1' + u_{1,\infty}, \quad u_2 = u_2' + u_{2,\infty}, \quad T = T_\infty + T', \quad P = P_\infty \left(\frac{T}{T_\infty}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}}. \tag{3.49}$$

Nous nous plaçons sur le domaine $\Omega = [0, L] \times [0, L]$ avec $L = 0{,}013$m associé à une discrétisation $N_{x,1} \times N_{x,2} = 81 \times 81$ avec les condition à gauche suivantes : $u_{1,\infty} = 200$ (m/s) et $u_{2,\infty} = 0.0$ (m/s), $T_\infty = 300$ (K) et $P\infty = 1.0$ (atm), des conditions latérales périodiques et la condition partiellement non réfléchissante à droite. Les résultats seront observés en fonction d'un temps adimenssionné $t^* = t/(L/u)$. Le paramètre σ de relaxation de la condition partiellement non réfléchissante est pris égal à 0.28, ce qui correspond à la valeur optimale proposée par Rudy et Strikwerda [229].

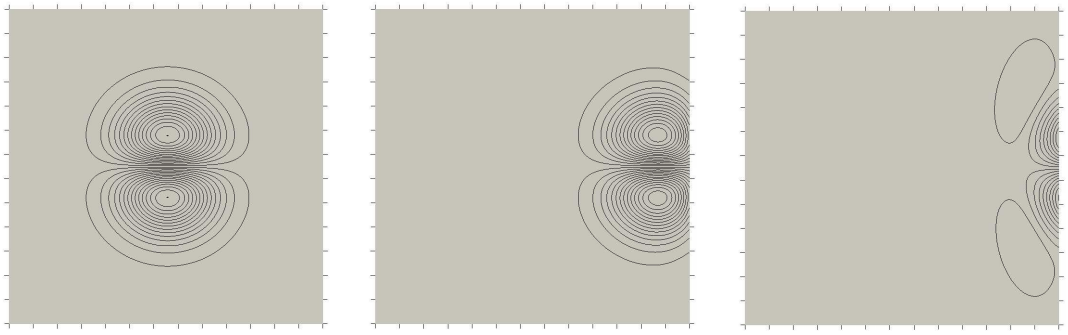
$$P^*(x,t) = \frac{P(x,t) - P_\infty}{P(0,0) - P_\infty}. \tag{3.50}$$

La pression est représentée en fonction de sa valeur relative par rapport à la pression du champ lointain et adimensionnée par la pression initiale du centre du tourbillon (3.50). Les Figure 3.7 et Figure 3.9 illustrent l'advection du tourbillon dans le domaine de calcul par le biais des iso-valeurs de la vitesse longitudinale, de pression et de vorticité. Nous remarquons que ces iso-lignes ne sont pas déformées au passage de la frontière. Par contre, le champs P^* est fortement perturbé lors de la sortie du tourbillon. Les extrema apparaissent lorsque le centre du tourbillon commence à quitter le domaine de calcul ($t^* = 0.6$). À cet instant, la différence $(P - P_\infty)$ est la plus grande et donc l'amplitude des ondes réfléchies à l'intérieur du domaine de calcul prend sa valeur maximale. Le même type de perturbations est observé pour la condition NSCBC simple testé dans la référence [168].



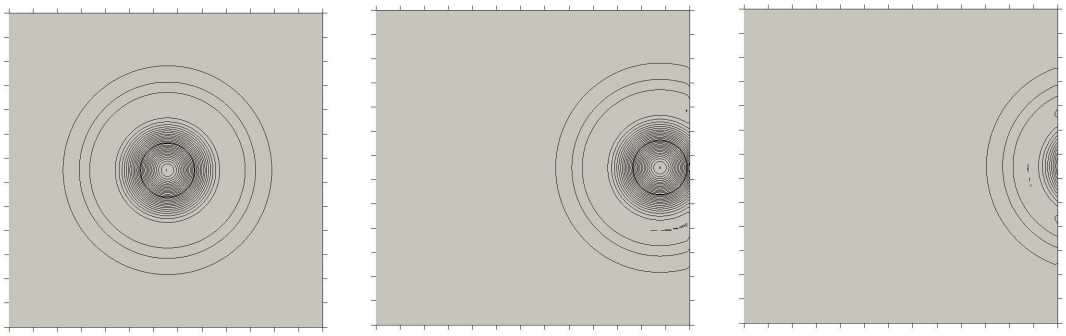
(a) $t^* = 0.0$ (b) $t^* = 0.6$ (c) $t^* = 1.0$

Figure 3.7. *Iso-contours de de P^* pour trois instants différents.*



(a) $t^* = 0.0$ (b) $t^* = 0.6$ (c) $t^* = 1.0$

Figure 3.8. *Iso-contours de la vitesse longitudinale pour trois instants différents.*



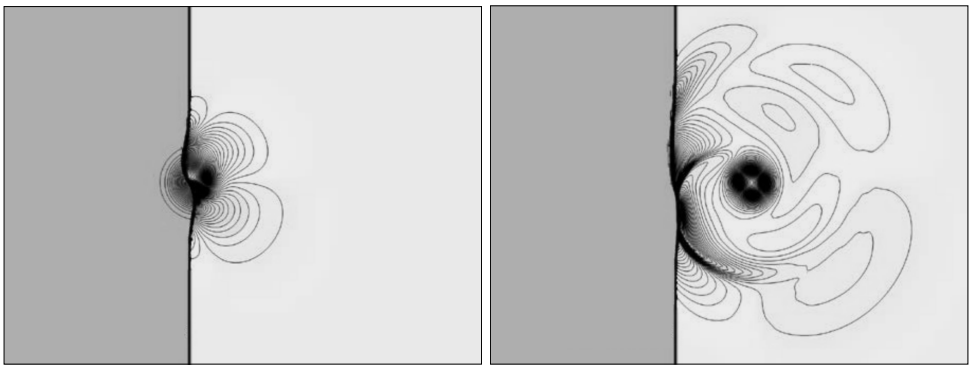
(a) $t^* = 0.0$ (b) $t^* = 0.6$ (c) $t^* = 1.0$

Figure 3.9. *Iso-contours de la vorticité pour trois instants différents.*

3.3.5 Interaction choc-tourbillon

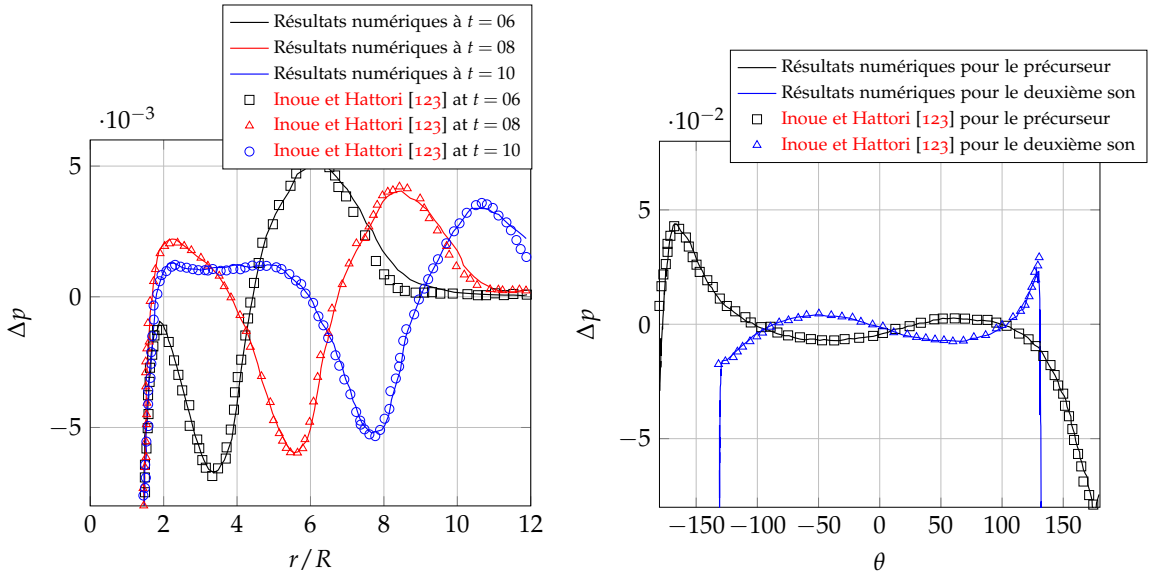
Le problème d'interaction entre un choc normal et un tourbillon isolé constitue la modélisation la plus simplifiée des interactions choc-turbulence. Plusieurs études expérimentales et numériques [70, 223, 123, 100] ont été consacrées à l'étude de ces interactions choc-tourbillons. Les conditions initiales consistent en un choc stationnaire dans un domaine rectangulaire $L_{x_1} \times L_{x_2} = [-70, 10] \times [0, 10]$. Le choc est placé à $x_1 = 0$ avec un nombre de Mach en amont $M_s = u_1/c_1$ de 1.2 (les indices $(.)_1$ correspondent à l'état amont du choc et $(.)_2$ à l'état aval), l'écoulement va de gauche à droite. La condition frontière à gauche du domaine est une entrée supersonique, et celle de gauche correspond à une condition de type NSCBC. Les frontières supérieure et inférieure sont périodiques. Le domaine de calcul est initialisé avec les valeurs $(\rho, u_1, u_2, P) = (1, M_s c_1, 0, 1/\gamma)$ en amont du choc, tandis que les valeurs aval du choc sont calculées *via* les relations de Rankine-Hugoniot. Un tourbillon de centre $(x_{1,c} = 4, x_{2,c} = 0)$ défini par le système d'équations (3.47) est superposé à l'écoulement en amont du choc. L'interaction entre le choc normal et le tourbillon peut se classifier en trois types selon Grasso et Pirozzoli [100] : l'interaction faible, la réflexion de Mach et la réflexion régulière. Ces classes dépendent de deux paramètres : (i) le nombre de Mach en amont M_s et (ii) Le nombre de Mach maximum du tourbillon M_v. Ce dernier est défini suivant les notations de (3.47) par

$M_v = \beta e^{-1/2}/R$. Le cas d'interaction étudié ici, correspondant à $M_s = 1.2$ et $M_v = 0.25$, se positionne dans la classe d'interaction de type réflexion de Mach. Il est résolu avec un maillage $N_{x_1} \times N_{x_2} = 1000 \times 1000$. Ce cas a aussi été traité par Inoue et Hattori [123] par le biais d'un calcul DNS.



(a) $t = 2$ (b) $t = 6$

Figure 3.10. *Représentation des contours du champ de pression.*



(a) (b)

Figure 3.11. *(a) Distribution radiale de ΔP pour $\theta = -45°$ à trois instants $t = 6, 8$ et 10, (b) Distribution circonférentielle de ΔP pour $r = 6$ (précurseur) et $r = 3.7$ (deuxième son) à $t = 6$*

La Figure 3.10 montre la cartographie des fluctuations de pression $\Delta P = (P - P_1)/P_1$ au temps normalisées $t = 2$ et $t = 6$. Deux ondes sonores (précurseur et deuxième son) sont générées à la suite de l'interaction primaire du tourbillon avec l'onde de choc. Les deux ondes sonores sont quadripolaires et déphasées les unes par rapport aux autres. Les solutions sont similaires à celles trouvées par Inoue et Hattori [123], qui ont été obtenues à l'aide d'un schéma compact centré d'ordre 6 et un schéma temporel de Runge-Kutta d'ordre 4. Quantitativement, la Figure 3.11(a) illustre une comparaison de l'évolution radiale de ΔP le long de la ligne d'angle $\theta = -45°$ par rapport à l'axe longitudinal de l'écoulement et passant par le centre $(x_{1,c}, x_{2,c})$ du tourbillon à trois instants $t = 6, 8$ et 10. La Figure 3.11(b) montre quant à elle

l'évolution circonférentielle des fluctuations de pression à $t = 6$ pour deux positions radiales $r = 7$ et $r = 3.2$ correspondant respectivement aux positions du précurseur et du second son. La Figure 3.11 nous permet de constater un bon accord entre les résultats obtenus par notre simualtion et ceux obtenus par Inoue et Hattori [123].

Récapitulatif

Nous avons décrit dans ce chapitre les méthodes numériques retenues pour la résolution du système d'équations de transport présenté dans le chapitre §2. Á la lumière des tests préliminaires que nous avons effectués pour valider notre code de calcul, nous pensons disposer d'un outil fiable et robuste pour étudier les différentes configurations envisagées dans le cadre de ce travail.

4

Étude bibliographique des méthodes de frontières immergées

Mini-sommaire

4.1 Position du problème **45**
4.2 Forçage continu **47**
4.2.1 Méthode de Peskin 48
4.2.2 Méthode de Pénalisation 50
4.3 Forçage discret **51**
4.3.1 Méthode de "maille fantôme" 51
4.3.2 Méthode de "maille coupée" 53
4.4 Avantages et inconvénients de chaque classe d'IBM **54**

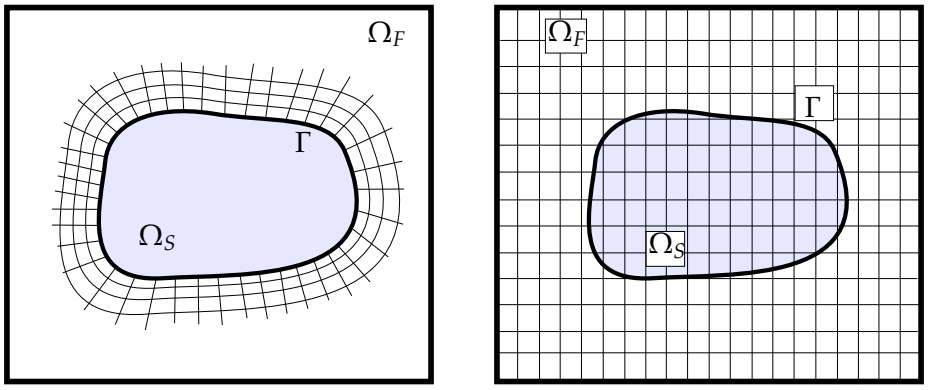
Ce chapitre vise à apporter une vue d'ensemble de l'approche de frontières immergées. Il nous permettra de retracer brièvement l'état de l'art de cette méthode et de présenter l'esprit général des différentes variantes qui s'en sont inspirées. Cette introduction s'inspire en partie des travaux de Iaccarino et Verzicco [122], Mittal et Iaccarino [190] et Sotiropoulos et Yang [245].

4.1 Position du problème

La simulation d'écoulements autour d'un objet (corps immergé) de géométrie complexe nécessite souvent le recours à un maillage adapté souvent distordu. Ce maillage doit prendre en compte de façon très précise la géométrie réelle de l'objet physique en s'appuyant sur la surface extérieure de ce dernier comme illustré sur la Figure 4.1(a). Cette stratégie (i) s'avère particulièrement préjudiciable au maintien de la précision des schémas numériques et (ii) rend la réalisation du maillage très complexe et coûteuse en temps, notamment lorsqu'il s'agit d'un corps rigide mobile ou un corps élastique. En effet, chaque modification de la position (souvent à chaque pas de temps) du corps immergé nécessite un remaillage, ce qui se traduit par un coût considérable de la simulation numérique. Plusieurs approches ont été proposées

dans l'optique de surpasser ces difficultés et de bénéficier des avantages liés à l'utilisation d'un maillage cartésien, qui sont en particulier :

- l'utilisation des schémas numériques simples d'ordre élevé ;
- la simulation des configurations 3D sans difficulté *a priori* ;
- la gestion relativement simple des déplacements des corps immergés.



(a) Maillage structuré adapté à la forme de l'objet

(b) Maillage structuré ne tenant pas compte de la forme de l'objet

Figure 4.1. *Illustration du maillage dans les cas d'une approche classique (a) et d'une approche de frontières immergées (b).*

Les méthodes dites de "Frontières Immergées", se sont ainsi développées depuis 4 décennies. La terminologie de Méthode de Frontières Immergées" (IBM ou *Immersed Boundary Method*) a été introduite et développée par Peskin (1972) [206] pour simuler initialement des écoulements de sang autour des valves de cœur. L'originalité de cette méthode réside dans le fait qu'elle permet de simuler l'écoulement sanguin du cœur sur un maillage cartésien structuré, et ce en résolvant un seul système d'équation, en l'occurrence celui du fluide (c.f. Figure 4.1(b)). L'écoulement fluide est résolu suivant une approche Eulérienne, alors que le solide est décrit par le biais d'une formulation Lagrangienne.

Pour décrire le principe de cette méthode, on considère un domaine de calcul Ω contenant un corps immergé, dans lequel évolue un écoulement incompressible visqueux. Ce domaine peut se décomposer en un domaine fluide Ω_F et un domaine solide Ω_S. L'interface fluide/solide est notée Γ telle que $\Gamma = \Omega_F \cap \Omega_S$ (cf. Figure 4.1). Par convention, on désignera par l'adjectif Eulérien la discrétisation de l'espace fluide Ω_F, et par Lagrangien la discrétisation de l'espace solide Ω_S. La frontière du milieu solide désignée par Γ peut éventuellement se déplacer par rapport à Ω_F. Le maillage fluide (ou Eulérien) reste quant à lui fixe. Dans le cas d'un écoulement incompressible, les équations régissant le fluide sont données par le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \dfrac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \dfrac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} & \text{dans } \Omega_F, \quad (4.1a) \\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 & \text{dans } \Omega_F, \quad (4.1b) \\ u_i = u_{s,i} & \text{dans } \Omega_S, \quad (4.1c) \end{cases}$$

où $u_{s,i}$ sont les composantes de la vitesse du solide. Le principe des méthodes de frontières

immergées consiste à discrétiser les deux équations (4.1a) et (4.1b) sur un maillage cartésien non-conforme à la géométrie du corps immergé tout en imposant la condition de bord (4.1c). Plusieurs variétés de la méthode IBM ont été proposées et appliquées dans des différentes configurations. Elles se différencient principalement par la manière d'imposer la condition limite sur le corps immergé. D'après Iaccarino et Verzicco [122], ces méthodes peuvent être classées principalement en deux grandes classes.

La première classe consiste à ajouter un terme source dans l'équation (4.1a) sous la forme d'une fonction de forçage. L'équation (4.1a) prendra ainsi la forme suivante :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + f_i^L \qquad \text{dans } \Omega, \tag{4.2}$$

où $\boldsymbol{f^L} = (f_1^L, f_2^L, f_3^L)$ désigne le terme de forçage. Plusieurs méthodes permettant de choisir la forme de cette force seront explicitées ultérieurement. La discrétisation du système d'équations (4.1) donne la forme générale :

$$[\mathcal{A}(\boldsymbol{u})]\{U\} = \{\boldsymbol{f^L}\} \quad \text{dans} \quad \Omega, \tag{4.3}$$

où $[\mathcal{A}(\boldsymbol{u})]$ est l'opérateur discret des équations de Navier-Stokes incompressibles, $\{U\} = \{\boldsymbol{u}, p\}$ et $\{f^L\}$ la fonction de forçage discret. Cette approche porte le nom de "forçage continu". Les méthodes s'inscrivant dans cette catégorie seront exposées dans la section §4.2.

Une deuxième classe des méthodes de frontières immergés consiste à laisser inchangée l'équation (4.1a) dans le domaine continu. Les équations sont discrétisées *a priori*, et le forçage est implicitement ou explicitement appliqué aux équations discrétisées au niveau des mailles proches de l'interface Γ. La discrétisation peut être ajustée pour prendre en compte la présence de l'interface. Le système linéaire à résoudre devient :

$$[\mathcal{A}'(\boldsymbol{u})]\{\underline{U}\} = \{\mathcal{F}^L\} \quad \text{dans} \quad \Omega, \tag{4.4}$$

où $[\mathcal{A}'(\boldsymbol{u})]$ est l'opérateur discret modifié des équations de Navier-Stokes incompressibles et $\mathcal{F}^L$ sont les termes permettant l'imposition des conditions de bord. Cette approche est appelée le "forçage discret". Nous exposerons deux variantes de cette approche dans la section §4.3.

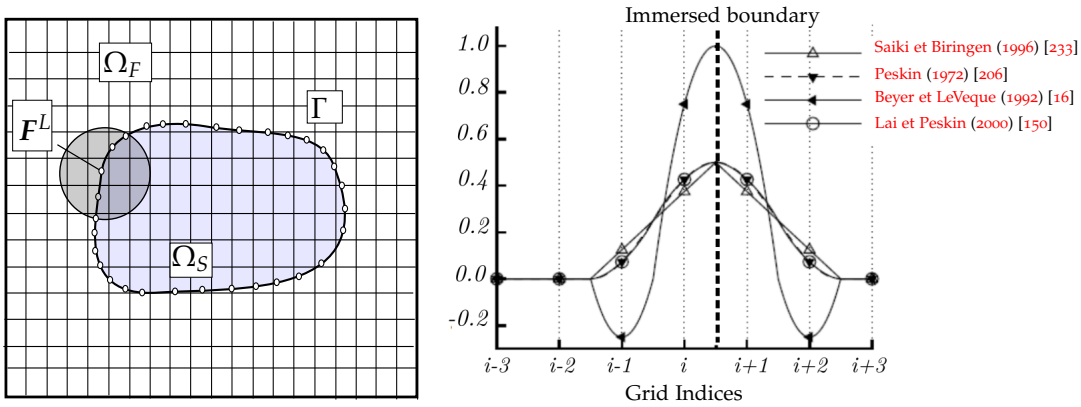
4.2 Forçage continu

Pour illustrer le concept des méthodes de frontières immergées basées sur l'approche de "forçage continu", nous allons présenter ici, sans vouloir être exhaustif, deux méthodes : la méthode originelle de frontières immergées présentée par Peskin [206] et la méthode de pénalisation d'Arquis et Caltagirone [5].

4.2.1 Méthode de Peskin

Comme il a été mentionné précédemment, la toute première méthode de frontière immergée a été développée par Peskin (1972) [206] afin de simuler un écoulement sanguin dans un valve mitrale, et ensuite dans un cœur à très faible nombre de Reynolds. Elle a été également utilisée avec succès pour simuler un nombre relativement important de configurations physiques [16, 207, 263]. Nous présentons ici la formulation générale de cette méthode en suivant l'esprit original de l'article de Peskin (2002) [208]. Bien que cet article ne soit pas son premier sur le sujet, puisque d'autres ont été publiés 30 ans auparavant [206], mais indubitablement c'est le plus abouti mathématiquement. Nous allons présenter la formulation dans le cadre des équations de Navier Stokes incompressibles discrétisées et résolues sur un maillage cartésien fixe, alors qu'elle a été présentée dans [208] suivant une formulation plus générale synthétisant n'importe quel système d'équations aux dérivées partielles, comme par exemple, les équations de Boltzmann dans le cadre de la méthode Lattice Boltzmann [287, 284]. Rappelons que le problème revient à imposer une condition sur la vitesse du fluide $\boldsymbol{u}$ à la paroi d'un solide en mouvement, ou en déformation par rapport au référentiel du fluide.

La frontière immergée est modélisée par une collection de fibres élastiques de telle sorte que leur position est suivie de manière Lagrangienne par un ensemble de points sans masse se déplaçant avec la vitesse locale du fluide.



(a) (b)

Figure 4.2. *(a) Représentation schématique de la diffusion du terme source sur des cellules voisines de la paroi. (b) Fonctions de distribution employées dans différentes études. D'après Iaccarino et Verzicco [122].*

D'un point de vue mathématique, chaque point discret de la frontière Γ est paramétré par l'abscisse curvilinéaire $\boldsymbol{q} = (q, r, s)$. Γ est décrite ainsi par un ensemble discret de points Lagrangiens $\chi(\boldsymbol{q}, t) = (\chi_1(\boldsymbol{q}, t), (\chi_2(\boldsymbol{q}, t), (\chi_3(\boldsymbol{q}, t))$. L'évolution temporelle de ces points est décrite par l'équation :

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} = \boldsymbol{U}(\chi(\boldsymbol{q}, t), t), \tag{4.5}$$

où $\boldsymbol{U}(\chi(\boldsymbol{q},t),t)$ est la vitesse locale du fluide interpolée sur le point $\chi(\boldsymbol{q},t)$. L'imposition de la condition de bord du corps immergé sur le fluide environnant est effectuée en transmettant les contraintes de la fibre au fluide à travers un terme de forçage local donné par :

$$\boldsymbol{f}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{x},t) = \int_{\Omega_S} \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{q},t),t)\delta(\boldsymbol{x}-\chi(\boldsymbol{q},t))\mathrm{d}\boldsymbol{q}, \tag{4.6}$$

avec δ la fonction de Dirac, $\boldsymbol{f}^{\boldsymbol{L}}$ la force Eulérienne exercée sur le fluide par les fibres élastiques par unité de volume et $\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}$ la contrainte exercée par le point Lagrangien $\chi(\boldsymbol{q},t)$ (cf. Figure 4.2(a)). Cette contrainte prend la forme générale :

$$\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}(\chi,t) = \mathcal{G}(\chi(\boldsymbol{q},t)). \tag{4.7}$$

$\mathcal{G}$ désigne l'opérateur par le biais duquel la force est construite, il peut être déterminé de différentes façons. Par exemple, dans le cas où la frontière immergée est élastique, $\mathcal{G}$ peut se calculer à partir de la loi de Hooke ou en le considérant comme dérivant de l'énergie interne du solide. L'équation (4.5), quant à elle, prend la forme suivante :

$$\boldsymbol{U}(\chi(\boldsymbol{q},t),t) = \int_{\Omega_F} u(\boldsymbol{x},t)\delta(\boldsymbol{x}-\chi(\boldsymbol{q},t))\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \tag{4.8}$$

En conséquence, dans le domaine continu, les équations qu'il convient de résoudre sont les suivantes :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + u_j\dfrac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x_i} - \nu\dfrac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = f_i^L & \text{dans } \Omega_F, & (4.9a)\\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 & \text{dans } \Omega_F, & (4.9b)\\ \boldsymbol{f}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{x},t) = \displaystyle\int_{\Omega_S} \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{q},t),t)\delta(\boldsymbol{x}-\chi(\boldsymbol{q},t))\mathrm{d}\boldsymbol{q}, & & (4.9c)\\ \dfrac{\partial \chi}{\partial t} = \displaystyle\int_{\Omega_F} u(\boldsymbol{x},t)\delta(\boldsymbol{x}-\chi(\boldsymbol{q},t))\mathrm{d}\boldsymbol{x}, & & (4.9d)\\ \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}(\chi,t) = \mathcal{G}(\chi(\boldsymbol{q},t)). & & (4.9e) \end{cases}$$

Nous nous arrêtons sur le sens des équations du système (4.9).

1. L'équation (4.9a) donne la solution $\boldsymbol{u}$ avec un terme de forçage extérieur $\boldsymbol{f}^{\boldsymbol{L}}$, en tout point du domaine Eulérien de calcul ;
2. l'équation (4.9c) est l'équation constitutive qui détermine le terme de forçage pour une position donnée de la frontière Γ et transfère la force au solveur Eulérien (*spreading*) ;
3. l'équation (4.9d) gouverne la dynamique de la frontière Γ dans l'espace Lagrangien et transfère la vitesse de l'espace Eulérien vers l'espace Lagrangien (interpolation).

Le point 1 est effectué dans l'espace Eulérien, tandis que les points 2 et 3 sont effectués dans l'espace Lagrangien. Les points 2 et 3 sont donc cruciaux : c'est le transfert des informations (vitesse et force) d'un espace à l'autre, qui est assuré par une convolution avec une fonction δ de Dirac. Bien entendu, cela n'est valable que dans un espace continu car dans l'espace discrétisé on va devoir approximer la fonction δ par un équivalent discret $\mathcal{D}$, basé sur une

approximation de la fonction δ de Dirac originale, non localisée en un point, et qui aura la forme d'une fonction "en cloche" et doit être lissée en raison de sa forte irrégularité (cf. Figure 4.2(b)). Cette fonction prend aussi le nom de noyau d'interpolation. La forme la plus communément utilisée pour l'expression de $\mathcal{D}$ est donnée par [167] :

$$\delta(\boldsymbol{x}) \approx \mathcal{D}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3} \varphi\left(\frac{x_1}{\Delta x_1}\right) \varphi\left(\frac{x_2}{\Delta x_2}\right) \varphi\left(\frac{x_3}{\Delta x_3}\right). \tag{4.10}$$

Dans cette expression, φ est une approximation de la fonction δ de Dirac, qui permet d'en obtenir un équivalent discret. Plusieurs définitions de φ ont été employées, la définition que nous avons considérées dans le cadre de ce travail sera explicitée dans la section §5.1.3.

4.2.2 Méthode de Pénalisation

Une approche similaire a été développée par Arquis et Caltagirone [5] et améliorée par Angot *et al.* [4] pour surpasser quelques inconvénients que présentent la méthode originale de Peskin [206]. L'une d'elle est la possibilité de fuites numériques du fluide au solide au niveau de l'interface, dues à la non conservation de la masse au niveau des particules Lagrangiennes [209]. Cette approche utilise le concept de milieu poreux pour définir le terme de forçage. Pour cela, Arquis et Caltagirone [5] considèrent le domaine entier Ω comme l'union de différents milieux : fluide Ω_F, poreux Ω_p et solide Ω_S. Chacun est caractérisé par une constante de perméabilité :

$$\xi(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \xi_f \to \infty & \text{dans } \Omega_F, \\ \xi_p & \text{dans } \Omega_p, \\ \xi_s \to 0^+ & \text{dans } \Omega_S. \end{cases} \tag{4.11}$$

Les milieux fluide et solide apparaissent donc comme limites d'un milieu poreux. La méthode consiste ensuite à ajouter un terme de traînée aux équations de Navier-Stokes définies sur le domaine Ω :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \dfrac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x_i} - \nu \dfrac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = f_i^L & \text{dans } \Omega, \quad (4.12a) \\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 & \text{dans } \Omega. \quad (4.12b) \end{cases}$$

Le terme de pénalisation $\boldsymbol{f}^L$ représente l'action du milieu poreux fictif sur l'écoulement et est défini par :

$$\boldsymbol{f}^L = -\frac{\varepsilon}{\xi}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_s), \tag{4.13}$$

où ε est la fonction Heaviside (égale à 1 dans Ω_S et 0 dans Ω_F). L'expression (4.13) permet de définir une condition de non-glissement sur un corps solide par pénalisation sur la vitesse. Arquis et Caltagirone [5] ont appliqué cette méthode en volumes finis. Dans leur approche,

tout volume appartenant au moins en partie au corps est muni d'une constante de perméabilité ξ_s. Ils ont exigé néanmoins un maillage suffisamment fin pour définir les frontières solides.

Cette méthode présente l'avantage d'être facile à implémenter, un simple terme algébrique devant être ajouté aux équations du mouvement. Elle permet aussi de calculer aisément la force exercée sur un corps par une intégration volumique plutôt que surfacique. Néanmoins, cette méthode comporte des défauts au moins aussi importants que ses qualités. En effet, le terme source (4.13) s'avère très raide lorsque ξ diminue, ce qui est nécessaire pour obtenir une solution précise. Enfin, cette force génère une couche limite dont l'épaisseur est liée à l'étalement du terme (4.13) autour de la position de la paroi fictive [245].

4.3 Forçage discret

Dans le but de s'affranchir de cette difficulté de modélisation que pose la première approche et de pouvoir étendre la méthode de frontières immergées à des écoulements faisant intervenir des grands nombres de Reynolds, une nouvelle approche, dite de 'forçage discret', a été mise en place originalement par Mohd-Yusof [191]. Le principe de cette approche est d'extraire le terme de forçage directement de la solution numérique. Le défi majeur de cette méthode est de pouvoir résoudre correctement les couches limites sur les corps immergés. Comme on l'a fait pour la première approche, le but ici est de présenter sommairement, à titre illustratif, deux méthodes dérivées de cette approches : la méthode dite de "maille fantôme" et "maille coupée".

4.3.1 Méthode de "maille fantôme"

Cette méthode, développée initialement pour simuler les écoulements incompressibles par Tseng et Ferziger [258], tente d'obtenir une bonne présentation de la frontière en utilisant une zone dite "fantôme", à l'intérieur du corps immergé sur lequel s'applique le terme de forçage. La zone "fantôme" est constituée de l'ensemble des points de maillage dits Points Fantômes (*Ghost-Points*) appartenant au domaine solide et ayant au moins un point dans le maillage Eulérien voisin. Pour mettre au clair le principe de cette méthode, on considère un corps immergé ayant des bords traversant des arêtes du maillage. On pose alors les équations de Navier Stokes incompressibles auxquelles on ajoute le terme de forçage :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \dfrac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial P}{\partial x_i} - \nu \dfrac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = f_i^L \xi_{GZ} & \text{dans } \Omega_F, \quad (4.14a) \\ \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 & \text{dans } \Omega_F, \quad (4.14b) \end{cases}$$

où ξ_{GZ} est la fonction indicatrice de la zone fantôme et $\boldsymbol{f}^L = (f_1^L, f_2^L, f_3^L)$ le terme de forçage. En considérant un schéma temporel de type Euler et indépendamment du schéma spatial,

imposer la condition de Dirichlet $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_s$, revient à imposer la fonction de forçage à l'instant $n+1$:

$$f_i^{L,n+1} = \frac{u_{s,i} - u_i^n}{\Delta t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x_i} - \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}. \tag{4.15}$$

Dès lors que la localisation de l'imposition de la condition de Dirichlet ne correspond pas à un point du maillage cartésien, une procédure d'extrapolation est nécessaire pour trouver la valeur de vitesse à imposer aux points fantômes. Tseng et Ferziger [258] propose de résoudre les équations de mouvement en utilisant la méthode "maille fantôme" qui consiste à détecter l'interface fluide-solide et repérer l'ensemble des cellules fantômes, ensuite à effectuer l'extrapolation sur les valeurs des cellules fantômes pour imposer les conditions de bord.

Dans la Figure 4.3, G représente le point fantôme, X_1 et X_2 sont les deux point fluides les plus proches de la frontière et O le nœud où la condition frontière est appliquée. Comme la démarche que nous allons décrire est applicable sur n'importe quelle variable décrivant l'écoulement, on note ainsi φ une variable d'écoulement quelconque que l'on souhaite interpoler. Une interpolation linéaire 2D classique de φ s'exprime par $\varphi = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2$. Les coefficients a_1, a_2 et a_3 sont déterminés avec une interpolation linéaire en termes des valeurs de $\{\boldsymbol{\varphi}\} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ sur les trois nœuds O, X_1 et X_2 respectivement :

$$\{\mathcal{A}\} = [\mathcal{B}]^{-1}\{\boldsymbol{\varphi}\}, \quad \text{avec} \quad \{\mathcal{A}\} = (a_1, a_2, a_3) \quad \text{et} \quad [\mathcal{B}] = \begin{pmatrix} 1 & x_1|_O & x_2|_O \\ 1 & x_1|_{X_1} & x_2|_{X_1} \\ 1 & x_1|_{X_2} & x_3|_{X_2} \end{pmatrix} \tag{4.16}$$

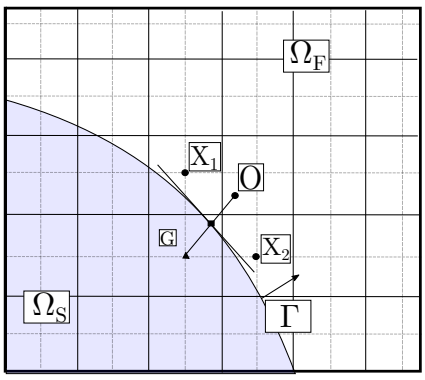


Figure 4.3. *Illustration de Méthode du "maille fantôme". D'après Tseng et Ferziger [258].*

Une fois que les coefficients sont identifiés, on peut connaître la valeur de φ sur le nœud fantôme G par extrapolation. le principal inconvénient de l'extrapolation de φ au niveau de G est que, dans certains cas, en l'occurrence quand O est très proche d'un nœud fluide utilisé dans l'extrapolation, les valeurs a_i peuvent devenir très négatives et importantes. Ceci induit des instabilités numériques et une convergence de la solution très lente, voire impossible. Pour remédier à cette difficulté, Tseng et Ferziger [258] ont proposé deux solutions. La première est de considérer, en plus de O, un point fluide I symétrique de G par rapport au point d'interface O. Dès lors, ils appliquent la relation d'ordre deux $\varphi_G = 2\varphi_O - \varphi_I$, où φ_I est calculé par une méthode d'interpolation similaire à celle présentée précédemment. La seconde solution consiste à modifier la position locale de l'interface en la déplaçant afin que O coïncide avec le point fluide.

4.3.2 Méthode de "maille coupée"

Cette méthode a été introduite par Clarke *et al.* (1986) [53] pour simuler des écoulements non visqueux autour d'une surface portante en utilisant la méthode des volumes finis. Puisque cette dernière méthode utilise la forme intégrale des équations de Navier-Stokes permettant de garantir la conservation globale et locale de la masse et de la quantité de mouvement, la méthode de "maille coupée" consiste à modifier les volumes de contrôle à l'interface du domaine fluide irrégulier (non cartésien) en les copiant et en les fusionnant, comme ce fût bien détaillé dans l'article de Ye *et al.* [282]. Les flux de masse, les flux convectifs et diffusifs ainsi que le gradient de pression doivent être recalculés sur chaque face des nouvelles cellules, ainsi cette méthode n'utilise pas de terme de forçage dans les équations de Navier-Stokes.

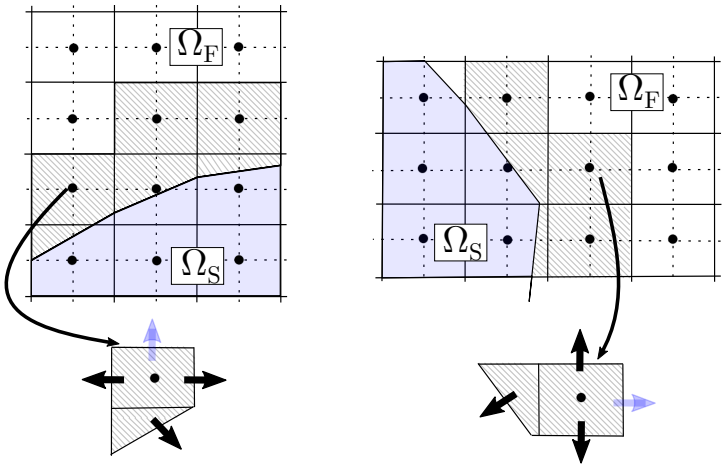


Figure 4.4. *Illustration de la méthode "maille coupée". D'après Ye et al. [282]).*

La Figure 4.4 montre l'application de la méthode de "maille coupée" pour définir de nouveaux volumes de contrôle conformes à la surface du corps immergé. Les équations de conservation sont alors discrétisées sur le nouveau maillage formé de l'ensemble des mailles, y compris les mailles coupées. La méthode est par conséquence conservative. Après l'identification des mailles qui se sitent sur la frontière fluide-solide, la recontruction des mailles coupées se fait en "écartant" la partie des mailles qui sont dans le solide. Cette procédure est à l'origine de la formation de volume de contrôle ayant une forme trapézoïdale (cf. Figure 4.4). L'approche, proposée par Ye *et al.* [282], exprime une variable du fluide φ sous forme d'une fonction d'interpolation polynomiale en deux dimensions et évaluant les flux sur la base de sur cette fonction. Par exemple, si nous voulons approximer le flux f_{SW} sur la face sud-ouest, alors φ (dans la région trapézoïdale de la partie droite de la Figure 4.5) est exprimé en termes de fonctions linéaire en x_1 et quadratique en x_2 :

$$\varphi_{SW} = a_1 x_{SW} x_{2,SW}^2 + a_2 x_{2,SW}^2 + a_3 x_{1,SW} x_{2,SW} + a_4 x_{2,SW} + a_5 x_{1,SW} + a_6. \tag{4.17}$$

Les coefficients $a_i, i = 1, \cdots, 6$ sont déterminés en écrivant $\varphi_i, i = 1, \cdots, 6$ suivant la Figure 4.5

comme :

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1,1}x_{2,1}^2 & x_{2,1}^2 & x_{1,1}x_{2,1} & x_{2,1} & x_{1,1} & 1 \\ x_{1,2}x_{2,2}^2 & x_{2,2}^2 & x_{1,2}x_{2,2} & x_{2,2} & x_{1,2} & 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{1,6}x_{2,6}^2 & x_{2,6}^2 & x_{1,6}x_{2,6} & x_{2,6} & x_{1,6} & 6 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_6 \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

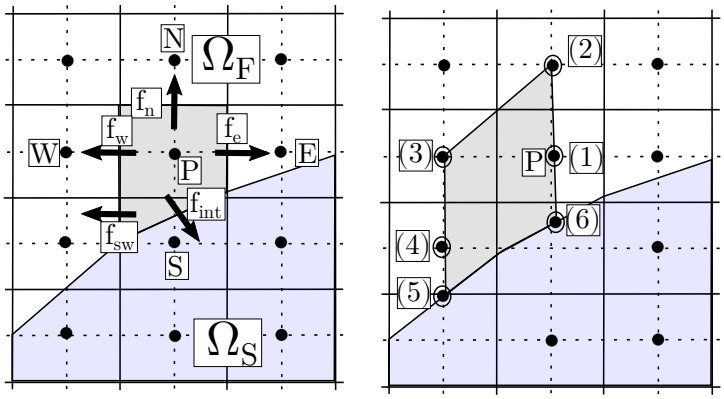


Figure 4.5. *Illustration de la méthode d'interpolation. D'après de Ye et al. [282].*

La difficulté principale de cette approche réside dans la capture de l'interface et le découpage des mailles, ainsi que dans la stabilisation des schémas numériques : la présence de mailles coupées restreint de manière considérable le CFL.

4.4 Avantages et inconvénients de chaque classe d'IBM

Les avantages de l'approche 'forçage continu" sont principalement :

1. elle est indépendante de la discrétisation spatiale. En effet, dans l'approche du 'forçage continu', le terme de forçage est introduit dans les équations d'écoulement avant que celles-ci soient discrétisées. Cela a l'avantage de permettre un plus grande latitude dans le choix des schémas de discrétisation ;
2. elle est bien adaptée pour des écoulement à bas nombre de Reynolds.

Nous relevons toutefois quelques inconvénients :

1. le lissage de la fonction de forçage conduit à une mauvaise modélisation de la frontière, ce qui restreint son utilisation à des écoulements à faible nombre de Reynolds ;
2. le choix aléatoire des coefficients qui sont inhérents à certaines dérivées de la méthode (par exemple la fonction de perméabilité ξ).
3. certaines dérivées intervenant dans cette approche nécessitent que la solution des équations de l'écoulement soit calculée à l'intérieur du corps immergé, où la solution n'est pas nécessaire ou physique [190].

Les avantages de l'approche du "forçage discret" sont :

1. elle assure une description correcte d'écoulement à grand nombre de Reynolds.
2. elle est relativement simple à implémenter.

Nous révélons toutefois les inconvénients suivants :

1. le forçage est introduit pendant la discrétisation et donc celui-ci dépend fortement des schémas numériques retenus par l'utilisateur.
2. la méthode peut engendrer des faibles pas de temps associés aux mailles coupées, ce qui induit des problèmes de stabilité.

Récapitulatif

La simulation numérique de l'écoulement autour d'un objet solide, avec une méthode de modélisation des parois par forçage, requiert la génération d'un maillage couvrant le domaine d'intérêt sans l'objet ainsi qu'une description géométrique de l'objet considéré. Nous avons discuté deux principales classes de méthodes de frontières immergés dont la différence principale réside dans la façon d'introduire le terme de forçage dans les équations de Navier-Stokes.

5

Méthode de frontières immergées mise au point

Mini-sommaire

5.1 Mise en oeuvre numérique de la méthode 58

5.1.1 Description surfacique d'une frontière immergée 58

5.1.2 Identification des points "fluide" et "solide" 58

5.1.3 Description de la méthode PVM 61

5.1.4 Description de la méthode GPM 64

5.1.5 Procédure du couplage 68

5.2 Validation de la méthode IBM développée 68

5.2.1 Plaque plane subsonique 69

5.2.2 Écoulements autour d'un cylindre 71

5.2.3 Interaction d'un obstacle avec une onde de choc issue d'une explosion à l'air libre 83

5.2.4 Marche montante 88

5.2.5 Écoulement subsonique autour d'une sphère 90

5.2.6 Écoulement supersonique autour d'une sphère 90

5.2.7 Écoulement supersonique autour d'un projectile 91

Nous décrivons dans ce chapitre la méthode de frontières que nous avons développée durant cette thèse pour simuler des écoulements compressibles. Cette méthode met à profit des deux approches précédemment introduites. Pour la première approche, on s'est inspiré des travaux de Lima E Silva *et al.* [163] qui ont introduit une méthode dérivée de l'approche "forçage direct" portant le nom "*Physical Virtual Model*" (qu'on notera par la suite PVM). Quant à la deuxième approche, on s'est inspiré des travaux de Chaudhuri *et al.* [48], qui ont développé une méthode de type "*Ghost-Point Method*" (qu'on notera par la suite GPM). Nous décrivons les différentes étapes nécessaires au couplage des deux méthodes, à savoir :

- l'identification de la nature des différents points utilisées par les deux méthodes, notamment le caractère solide ou fluide des points du maillage, les points d'interpola-

tion utilisées pour approximer le terme de forçage pour la méthode PVM et les points fantômes et images pour la méthode GPM;
- le calcul du terme de forçage via la méthode PVM;
- le traitement des points fantômes par la méthode de GPM;
- la validation de la méthode couplée PVM-GPM sur une série de cas tests bien documentés.

Les travaux présentés ici ont fait l'objet d'une publication dans *Computers & Fluids* [30] et ont été également présentés au colloque *ICDERS* en 2015 [28].

5.1 Mise en oeuvre numérique de la méthode

5.1.1 Description surfacique d'une frontière immergée

La première étape de la procédure consiste à décrire la surface de l'objet immergée. Nous avons choisi dans ce travail de réaliser cette description via le format STéréo-Lithographique (STL). Ce format permet de représenter la surface de tout objet par l'intermédiaire d'une collection de triangles T^L $(L = 1\ ,\cdots,\mathcal{N}_{\text{tr}})$ avec $\mathcal{N}_{\text{tr}}$ le nombre total de triangles. Chaque triangle, de surface inversement proportionnelle à la courbure locale de la géométrie réelle de l'objet (cf. Figure 5.1), est défini par les coordonnées cartésiennes dans un trièdre direct de son vecteur normal $\boldsymbol{n}$ orienté vers l'extérieur et de ses trois sommets ordonnés dans le sens trigonométrique. Le principal inconvénient du format STL est que les surfaces à courbure faible nécessitent une grande résolution de maillage pour une leurs bonnes représentation. Par contre, l'avantage d'un tel format, largement utilisé dans l'industrie et en particulier dans le secteur de la production, est sa simplicité d'utilisation. En effet, ce format ne comporte que le minimum nécessaire à la description d'un objet 3D. Pour le besoin de la méthode PVM, chaque triangle T^L définit par le biais de ses sommets un seul et unique point Lagrangien, en l'occurrence il s'agit de son centre de gravité $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}$.

5.1.2 Identification des points "fluide" et "solide"

Une fois la lecture du fichier STL terminée, déterminer la nature d'un point du maillage Eulérien, *fluide* ou *solide* est une étape importante, d'autant plus le cas d'un corps est en mouvement. En effet, les équations de Navier-Stokes ne sont résolues que sur les points Eulériens du maillage, ce qui implique qu'en général les points Lagrangiens de l'objet immergé ne coïncident pas avec les points Eulériens du maillage. Ce problème, connu sous le nom de *point dans un polyèdre*, consiste à déterminer si un point P de l'espace est à l'intérieur ou à l'extérieur d'un polyèdre défini par ses frontières, ce qui permet ensuite de définir un

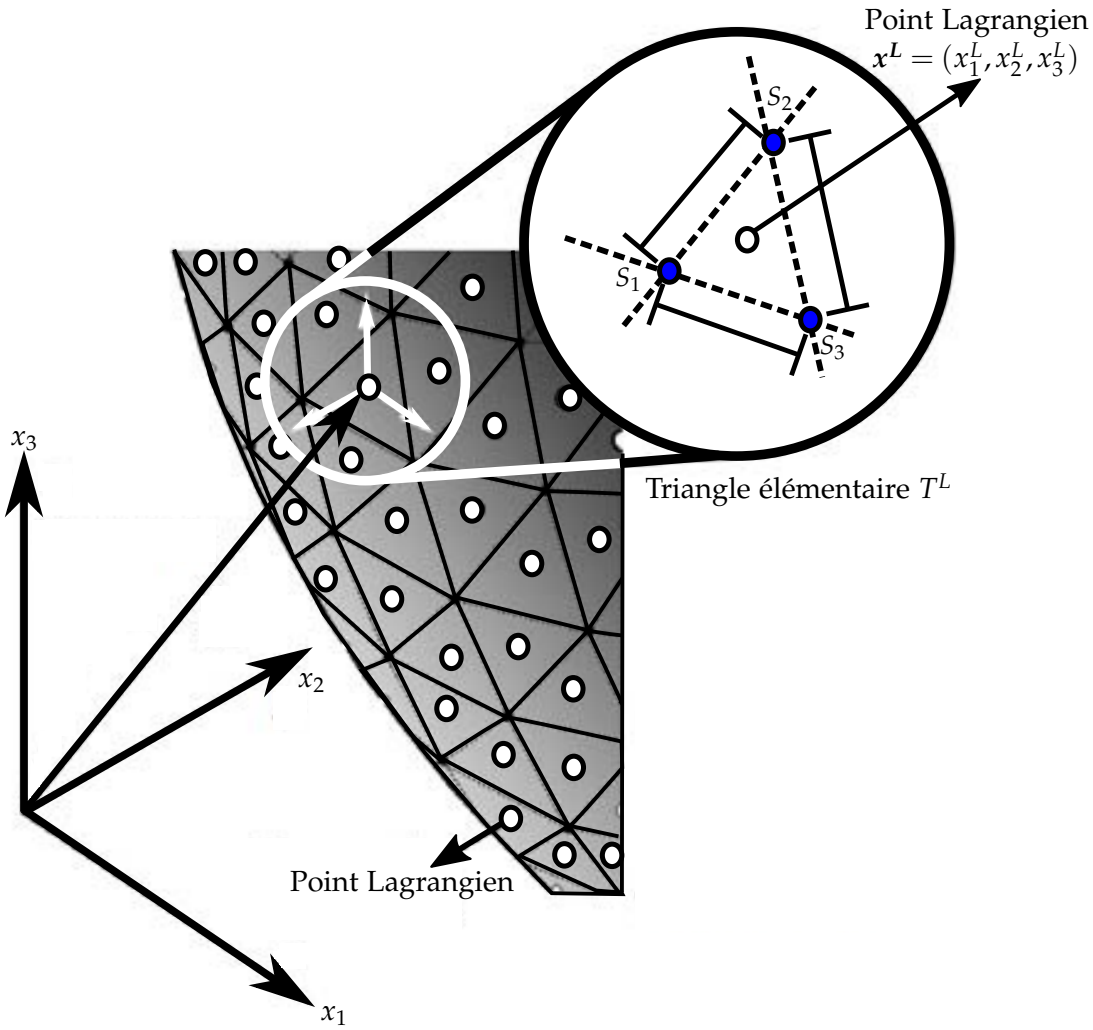


Figure 5.1. *Illustration de la représentation triangulaire de la surface d'une frontière immergée sphérique dans un maillage cartésien et définition du point lagrangien $\boldsymbol{x^L}$ dans le triangle élémentaire T^L.*

marqueur $\zeta(\boldsymbol{x}, t)$ sous la forme suivante :

$$\zeta(\boldsymbol{x}, t) = \begin{cases} 0 \text{ si } \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^t \in \Omega_{\mathrm{F}}, \\ 1 \text{ si } \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^t \in \Omega_{\mathrm{S}}. \end{cases} \tag{5.1}$$

Pour le cas bidimensionnel, le problème revient à déterminer si le point P est à l'intérieur ou à l'extérieur d'un polygone. Parmi les méthodes proposées dans la littérature, comprenant entre autres la méthode de lancé de rayon (*Ray-Casting method*), la méthode du nombre de spires (*Winding Number method*) ou la méthode du tracé de rayon (*Ray-Tracing method*, notée ci-après par RT). Nous avons choisi la dernière qui est la plus répandue dans la littérature [60, 24].

Le principe de cette méthode, basé sur le théorème de Jordan [246], est (i) de tracer un rayon à partir d'un point Eulérien de contrôle, i.e. une droite allant à l'infini, et (ii) de compter le nombre d'intersections avec le maillage Lagrangien représenté par les arêtes du polygone.

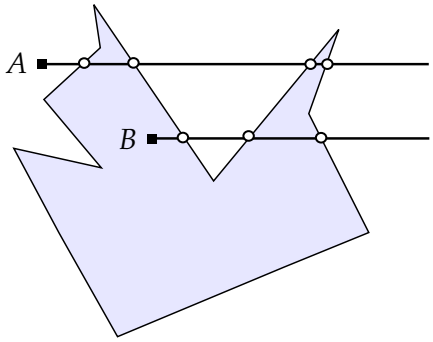


Figure 5.2. *Illustration de la technique du tracé de rayon sur un polygone.*

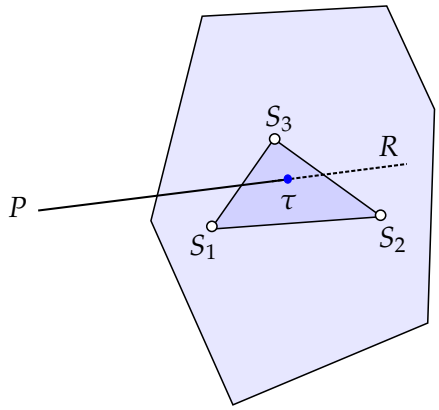


Figure 5.3. *Illustration d'un rayon en intersection avec un triangle.*

Si le nombre d'intersections est pair, le point Eulérien se trouve à l'extérieur (point A de la Figure 5.2), et à l'inverse si le nombre d'intersections est impair, le point Eulérien se trouve à l'intérieur (point B de la Figure 5.2). Le rayon peut être défini soit par un point d'arrivée mis loin en dehors du solide, ou une direction fixée. Dans le cadre de cette thèse, une version améliorée de la méthode RT est utilisée [24]. Elle consiste à entourer l'objet immergé par un cadre, défini comme étant le rectangle le plus petit qui contient tous les triangles T^L. La taille de ce rectangle peut être défini mathématiquement par :

$$[x_1^{\min}, x_1^{\max}] \times [x_2^{\min}, x_2^{\max}] \times [x_3^{\min}, x_3^{\max}], \tag{5.2}$$

avec $x_i^{\min} = \min_{L=1,\cdots,\mathcal{N}_{\text{tr}}} x_i^L$ et $x_i^{\max} = \max_{L=1,\cdots,\mathcal{N}_{\text{tr}}} x_i^L$ pour $i = 1,2$ et 3. Ensuite, tout point Eulérien de contrôle situé à l'extérieur de ce rectangle de délimitation est un point fluide.

La méthode peut être étendue systématiquement au cas tri-dimensionnel, sous réserve que le décompte des intersections soit effectué correctement entre le rayon de la méthode RT et les triangles T^L. La réalisation de cet algorithme nécessite les deux étapes suivantes :

1. Déterminer le point d'intersection entre le rayon et le plan contenant le triangle ;
2. Déterminer si le point intersection se trouve à l'intérieur du triangle.

Les coordonnées d'un point $\tau = (x_1^\tau, x_2^\tau, x_3^\tau)$ dans un triangle défini par ses trois sommets $S_j = (x_{1,j}, x_{2,j}, x_{3,j})$, $j = 1,2,3$, peut s'exprimer par :

$$x_i^\tau(a,b) = (1-a-b)x_{i,1} + ax_{i,2} + bx_{i,3}, \tag{5.3}$$

avec $a > 0$, $b > 0$ et $a + b \leq 1$. Les coordonnées du rayon $\boldsymbol{PR} = (PR_1, PR_2, PR_3)$ peuvent s'écrire comme suit :

$$PR_i(\delta) = P_i + \delta e_i, \tag{5.4}$$

avec $\delta > 0$ et $e_i = PR_i / \sqrt{PR_1^2 + PR_2^2 + PR_3^2}$. Trouver le point d'intersection entre le rayon PR et le triangle, revient à chercher l'inconnu δ tel que :

$$PR_i(\delta) = x_i^\tau(a,b), \text{ pour } i = 1,2,3. \tag{5.5}$$

Si la solution de l'équation (5.5) satisfait $\delta > 0,\ a \geq 0,\ b \geq 0$ et $a + b \leq 1$, alors le rayon $\boldsymbol{PR}$ intersecte le triangle. Pour certaines surfaces complexes, au lieu de tracer seulement un seul rayon par point de contrôle, on en trace deux avec deux directions différentes. Il convient de noter ici que la procédure d'intersection des triangles décrite dans ce document n'est pas aussi efficace qu'elle pourrait l'être. En effet, on peut par exemple accélérer cette procédure en projetant d'abord tous les triangles T^L sur un plan 2D, puis en effectuant les calculs en 2D. Pour plus de détails méthodologiques à propos de cette procédure et d'autres méthodes d'intersection triangle-rayon optimisées dépassent le cadre de ce document, le lecteur intéressé pourrait se référer aux articles [278, 57, 56].

5.1.3 Description de la méthode PVM

Nous allons décrire maintenant la mis en œuvre de la méthode PVM permettant de proposer une modélisation du champ de force Lagrangien de l'équation (4.2). Nous rappelons que l'idée de base est la reconstruction de l'écoulement sur les points Lagrangiens au moyen d'un terme de forçage ou une fonction de transfert utilisée pour distribuer l'effet de ceux-ci sur le maillage cartésien. Ceci établit une relation biunivoque entre les deux maillages sur le support compact de la fonction de transfert. La particularité de cette méthode est que :

— elle n'introduit aucune constante à ajuster, à l'inverse de la méthode pénalisation par exemple §4.2.2 ;

— elle ne requiert aucun schéma d'interpolation au voisinage des points Lagrangiens.

Le principe est d'introduire un terme source ρf_i^L dans les équations de Navier-Stokes (2.1d), notamment dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i^L, \tag{5.6}$$

le terme f_i^L est évalué à partir d'un champ de force Lagrangien F_i^L, représentant la force d'un élément de surface de la frontière immergée appliquée sur le fluide et calculée grâce à l'introduction de points Lagrangiens sur la frontière immergée par l'expression suivante :

$$f_i^L(x_i) = \int_\Gamma F_i^L\left(x_i^L(s,t) - x_i\right) \cdot \delta\left(x_i^L(s,t) - x_i\right) \cdot ds, \tag{5.7}$$

où $\boldsymbol{x} \equiv (x_1, x_2, x_3)^t$ représente un point Eulérien du maillage, $\boldsymbol{x^L} \equiv \left(x_1^L, x_2^L, x_3^L\right)^t$ un point Lagrangien de la surface de la frontière immergée. La dépendance de la distribution de Dirac de l'équation (4.10) vis-à-vis du maillage permet de retrouver naturellement la fonction de Dirac comme une limite pour Δx_i tendant vers 0. Il y a deux points importants dans le choix de la discrétisation du noyau de Dirac :

- le premier concerne la régularité de la fonction à interpoler. On souhaite donc une discrétisation d'interpolation meilleure qu'une interpolation linéaire qui aurait tendance à introduire des discontinuités sur la dérivée de cette fonction. Il est donc naturel d'imposer que le noyau d'interpolation φ soit continue et à dérivée continue, mais ce

n'est pas suffisant.

- le deuxième point quant à lui concerne l'ordre d'interpolation. Ceci se traduit par des conditions particulières que doit vérifier le noyau d'interpolation φ sur ses moments statistiques.

En fonction de ces deux exigences, les postulats suivants peuvent être énoncés en termes de fonction $\varphi(r)$, où r désigne $x_i/\Delta x_i$. Ces conditions à satisfaire, exprimées sous forme discrète, sont les suivantes :

$$\begin{cases} \varphi(r) \text{ est continue pour tout réel } r, & (5.8a) \\ \varphi(r) = 0 \text{ pour } \|r\| \geq 2, & (5.8b) \\ \sum_j \varphi(r-j) = 1 \text{ pour tout réel } r, & (5.8c) \\ \sum_j (r-j)\varphi(r-j) = 0 \text{ pour tout réel } r. & (5.8d) \end{cases}$$

La condition (5.8a) est une condition de continuité utilisée pour permettre une transmission progressive de la force au domaine fluide, ce qui réduit la raideur de (5.6) et facilite la résolution numérique. La condition (5.8b) de support compact est imposée pour des raisons d'efficacité de calcul. En effet, elle permet de limiter le nombre de points du maillage cartésien qui interagissent avec le maillage Lagrangien. Peskin propose une borne égale à 2 parce qu'elle convient à son schéma de discrétisation. La condition pourrait cependant être énoncée de façon générale, i.e. $|r| \geq C$ où C est une constante déterminée par l'utilisateur. La condition (5.8c) exprime la conservation de la force lors de la distribution sur le maillage cartésien. La condition (5.8d) assure que l'interpolation des fonctions non linéaires est au moins d'ordre deux. La forme discrétisée retenue dans le cadre de cette thèse est celle suggérée par Peskin [208], et dans nombreux autres travaux par la suite [135, 136] :

$$\varphi(\|r\|) = \begin{cases} \varphi_1(\|r\|) & \text{si } \|r\| \leq 1, \\ \frac{1}{2} - \varphi_1(2 - \|r\|) & \text{si } 1 < \|r\| \leq 2, \\ 0 & \text{si } 2 < \|r\|, \end{cases} \tag{5.9}$$

avec $\varphi_1(\|r\|) = \left(3 - 2\|r\| + \sqrt{1 + 4\|r\| - 4\|r\|^2}\right)/8$. Cette forme discrétisée offre un bon compris entre le temps et la précision de calcul [32] et permet d'évaluer la vitesse du fluide du point Lagrangien $\boldsymbol{x}_L$ utilisée pour déterminer la distribution de la densité de force $\boldsymbol{F}^L$:

$$\boldsymbol{F}^L(\boldsymbol{x}^L) = \frac{\boldsymbol{u}^L - \boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x}^L\right)}{\Delta t}, \tag{5.10}$$

où $\boldsymbol{u}^L = \left(u_1^L, u_2^L, u_3^L\right)$ représente la vitesse de l'objet immergée (égale à zéro si l'objet est immobile) et $\boldsymbol{u}\left(\boldsymbol{x}^L\right)$ est la vitesse du fluide au point Lagrangien $\boldsymbol{x}^L$. Le sens physique de l'équation (5.10) est le suivant : lorsque la frontière du solide est sollicitée par le fluide, chaque point Lagrangien est légèrement déplacé, ce qui mène à un déplacement de $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^L) - \boldsymbol{u}^L$ en

chaque point Lagrangien. Ceci génère alors une force de rappel (comme un ressort linéaire) qui tend à ramener chaque point Lagrangien vers sa position d'équilibre. La relation (5.10) est calculée en chaque point Lagrangien de la frontière au temps t, et $1/\Delta t$ est la raideur du ressort de rappel. Si la valeur de la raideur est élevée, la force de rappel est alors très rapide, ce qui engendre de fortes vitesses par cette force, et donc des limitations en termes de critère de CFL. L'évaluation de la vitesse $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x_L})$ est effectuée selon la formule :

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}) = \sum^{\mathcal{N}_{\text{int}}} \varphi\left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}\right) \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}) \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3, \tag{5.11}$$

où la somme s'étend sur les valeurs de vitesse $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ des points Eulériens voisins utilisés pour approximer $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}})$. Pour déterminer le nombre de points Eulériens $\mathcal{N}_{\text{int}}$ servant pour l'interpolation, nous associons un support d'interpolation à chaque point Lagrangien $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}$. Ce support est défini par un sphère (ou un cercle dans le cas bidimensionnel) de rayon r et de centre $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}$ comme illustré sur la Figure 5.4 dans le cas bidimensionnel en couleur rouge. La valeur du rayon r du support d'interpolation détermine le nombre de points Eulériens utilisés pour effectuer l'interpolation (points ■ de la Figure 5.4). Afin de garantir un nombre de points suffisant pour l'interpolation et assurer un bon compromis entre une bonne précision numérique et un temps de calcul raisonnable, nous avons fixé comme critère pour répondre à ces deux exigences un rayon r supérieur à $3.5h$ où $h = \max\{\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3)$.

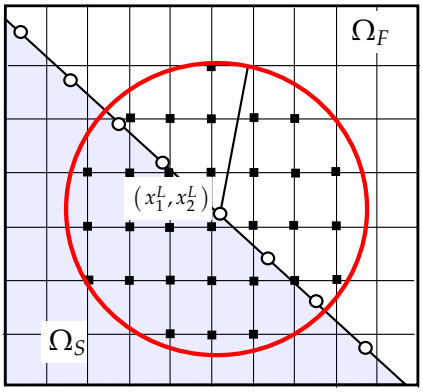


Figure 5.4. *Illustration 2D du support d'interpolation en rouge autour de* $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}} = \left(x_1^L, x_2^L\right)$.

Le passage du maillage Lagrangien vers le maillage Eulérien est réalisé en distribuant la force $\boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}$ définie par l'équation (5.10), et ce en sommant sur tous les triangle élémentaires T^L pour $L = 1, \cdots, \mathcal{N}_{\text{tr}}$ comme suit :

$$\boldsymbol{f}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{x}) = \sum_{L=1}^{\mathcal{N}_{\text{tr}}} \varphi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}) \boldsymbol{F}^{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}) \Delta \mathcal{V}^L, \tag{5.12}$$

où $\Delta \mathcal{V}^L$ représente un volume caractéristique élémentaire associé au point Lagrangien $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{L}}$. Dans le cadre de cette thèse, nous avons pris $\Delta \mathcal{V}^L = \Delta A^L \Delta S^L$ où ΔA^L et ΔS^L désignent respectivement une longueur caractéristique et l'aire du triangle élémentaire T^L (cf. Figure 5.1). Si nous notons les côtés du triangle T^L par $P_2 = \overline{S_2 S_3}$, $P_2 = \overline{S_2 S_3}$ et $P_3 = \overline{S_3 S_1}$, alors nous pouvons écrire ΔS^L comme $\Delta S_l = (P_1 + P_2 + P_3)/3$. La quantité ΔA^L, quant à elle, peut se déduire de la formule de Heron par $\Delta A^L = \sqrt{P(P - P_1)(P - P_2)(P - P_3)}$ où P est le

semi-périmètre du triangle $P = (P_1 + P_2 + P_3)/2$.

5.1.4 Description de la méthode GPM

Dans le cas d'un écoulement à faible nombre de Mach, l'influence des variations de vitesse ou de quantité de mouvement sur l'énergie totale est négligeable puisque l'énergie cinétique de l'écoulement est relativement petite rapport à l'énergie sensible (l'énergie thermique). Afin de tenir compte de la compressibilité de l'écoulement et des échanges thermiques entre le solide et le fluide dans le cas d'un écoulement à grand nombre de Mach, il faut s'intéresser de plus près à l'équation de conservation de l'énergie et à la manière dont elle est affectée par la présence de l'objet. Pour ce faire, une variante de la méthode de GPM sera combinée avec la méthode PVM. Cette méthode nous permet d'imposer les conditions frontières de type scalaire au niveau de la surface du cors immergé, en l'occurrence, il s'agit des conditions limites sur la masse volumique, l'énergie interne, et les fractions massiques des espèces.

La méthode consiste à écrire des conditions limites particulières sur les points fantômes "Ghost", notés *GP* sur la Figure 5.5 et appartement à l'ensemble des points Ω_{GP}.

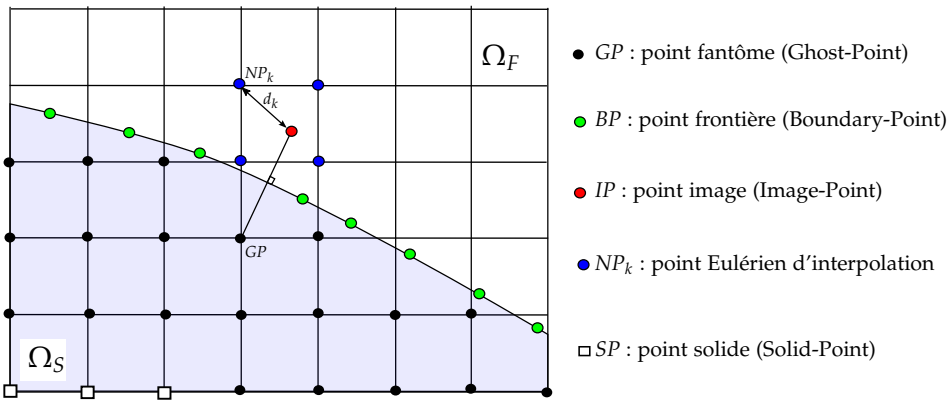


Figure 5.5. *Définition des points utilisés pour la méthode GPM. La situation d'interpolation illustrée est la situation régulière où le point image se trouve entouré par quatre points Eulériens voisins d'interpolation NP_k, avec $k = 1, \cdots, 4$.*

Identification des points fantômes : la première étape consiste en l'identification des points fantômes Ω_{GP} définis comme étant des points appartenant à l'ensemble des points solides Ω_{S} ayant au moins points voisins appartenant à l'ensemble des points fluides Ω_{F}. Pour tenir compte du stencil utilisé dans le solveur CREAMS, nous allons identifier trois couches de points solides proches de la paroi. L'ensemble Ω_{GP} est ainsi défini par :

$$\Omega_{\mathrm{GP}} = \left\{ (x_{1,m}, x_{2,n}, x_{3,p})^t \in \Omega_{\mathrm{S}} \text{ si } \exists (x_{1,i}, x_{2,j}, x_{3,k})^t \in \Omega_{\mathrm{F}} \text{ tel que } \; i \in I_m \vee j \in I_n \vee k \in I_p \right\}, \tag{5.13}$$

où $I_m = [m-3, m+3]$, $I_n = [n-3, n+3]$ et $I_p = [p-3, p+3]$ comme illustré sur la Figure 5.5. Dans le cas où l'objet immergé est immobile, la détermination de l'ensemble Ω_{GP} s'effectue

une seule fois pour toute, au début de la simulation.

Identification des points images : l'ensemble des points images Ω_{IP} se construit à partir de l'ensemble des points fantômes. Nous commençons par chercher le triangle le plus proche en terme de distance. Il existe de nombreuses méthodes permettant de calculer le champ distance d'un solide géométrique. Pour chaque point du maillage, nous déterminons le point de la surface discrétisée en calculant la projection orthogonale sur le solide. Nous rappelons que le format STL fournit directement la normale à chaque triangle du maillage surfacique, ceci nous permet de trouver le plan Euclidien correspondant à chaque triangle. En effet, soit $A = (x_1^A, x_2^A, x_3^A)$ un point fantôme dans l'espace, $\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$ un vecteur normale à un triangle T^L identifié par ces trois sommets $S^L = (x_1^L, x_2^L, x_3^L)$. Une équation cartésienne du plan P^L contenant T^L est donnée par $n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3 + d = 0$, avec $d = -\left(n_1 x_1^L + n_2 x_2^L + n_3 x_3^L\right)$. Ainsi, la distance d_{A,P^L} entre le point A et le plan P^L est donnée par :

$$d_{A,P^L} = \frac{|\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S_1 A}|}{\|\boldsymbol{n}\|} = \frac{\left|n_1 x_1^A + n_2 x_2^A + n_3 x_3^A + d\right|}{\sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}}, \tag{5.14}$$

le triangle le plus proche du point A est ainsi donné par $L \in \{1, 2, \cdots, \mathcal{N}_{\text{tr}}\}$ tel quel

$$\min_{L \in \{1,2,\cdots,\mathcal{N}_{\text{tr}}\}} d_{A,P^L} \tag{5.15}$$

L'avantage de cette méthode réside dans sa simplicité. Néanmoins, elle présente l'inconvénient d'être coûteuse en temps de calcul, notamment quand l'objet immergé est en mouvement. En effet, le temps de calcul de la méthode est en $\mathcal{O}\left(K \times N_{x_1} \times N_{x_2} \times N_{x_3}\right)$. Afin de diminuer le nombre de comparaison nécessaire et réduire le temps de calcul de cette méthode, nous nous limitons à calculer la distance minimale par la projection orthogonale à un certain nombre de points du maillage triangulaire de la surface de l'objet immergé [177]. Une fois le triangle T^L le plus proche du point fantôme (x_1, x_2, x_3) trouvé, le point image unique $(x_1, x_2, x_3) \in \Omega_F$ correspondant est construit comme suit :

$$\Omega_{\text{IP}} = \left\{(x_1^*, x_2^*, x_3^*) \in \Omega_F \,, \exists!(x_1, x_2, x_3) \in G_{\text{GP}} \wedge D\left[(x_1^*, x_2^*, x_3^*) \perp T^L\right] = D\left[(x_1, x_2, x_3) \perp T^L\right]\right\}, \tag{5.16}$$

où $D\left[(x, y, z) \perp T^L\right]$ est la projection orthogonale du point (x, y, z) sur la triangle T^L. Cette même procédure reste encore valide pour le cas bidimensionnel. La Figure 5.5 illustre un exemple d'identification du point image à partir d'un point fantôme.

Reconstruction des points images : le point image ne coïncide pas naturellement avec un nœud de la grille du maillage. Nous devons donc interpoler la valeur d'une variable φ quelconque au niveau de ce point à partir de ses huit (quatre en 2D) plus proches voisins. Pour ce faire, deux méthodes ont été implémentées au sein de notre solveur :

- la première utilise les polynômes de Lagrange du second ordre. Considérons un cas

tridimensionnel et notons un point image $I(\boldsymbol{x}_{\mathrm{IP}}) = (x_1^*, x_2^*, x_3^*) \in \Omega_{IP}$. De même, notons les huit noeuds voisins les plus proches NP_k, avec $k = 1, \cdots, 8$ tels que $(x_1^*, x_2^*, x_3^*) \in [x_{1,1}, x_{1,2}] \times [x_{2,1}, x_{2,2}] \times [x_{3,1}, x_{3,2}]$ (ce qui revient à chercher la maille entourant le point $I(\boldsymbol{x}_{\mathrm{IP}})$) . Soient $\Phi_k = L_{NP_k}$ les polynômes de Lagrange correspondant à l'interpolation :

$$\varphi(\boldsymbol{x_{IP}}) = \sum_{i=1}^{8} \varphi_{NP_i} \Phi_k, \tag{5.17}$$

où

$$\begin{cases} \Phi_1 = \frac{(x_1^*-x_{1,2})(x_2^*-x_{2,2})(x_3^*-x_{3,2})}{(x_{1,1}-x_{1,2})(x_{2,1}-x_{2,2})(x_{3,1}-x_{3,2})} \\ \Phi_2 = \frac{(x_1^*-x_{1,1})(x_2^*-x_{2,2})(x_3^*-x_{3,2})}{(x_{1,2}-x_{1,1})(x_{2,1}-x_{2,2})(x_{3,1}-x_{3,2})} \\ \Phi_3 = \frac{(x_1^*-x_{1,2})(x_2^*-x_{2,1})(x_3^*-x_{3,2})}{(x_{1,1}-x_{1,2})(x_{2,2}-x_{2,1})(x_{3,1}-x_{3,2})} \\ \Phi_4 = \frac{(x_1^*-x_{1,1})(x_2^*-x_{2,1})(x_3^*-x_{3,2})}{(x_{1,2}-x_{1,1})(x_{2,2}-x_{2,1})(x_{3,1}-x_{3,2})} \end{cases} \quad \begin{cases} \Phi_5 = \frac{(x_1^*-x_{1,2})(x_2^*-x_{2,2})(x_3^*-x_{3,1})}{(x_{1,1}-x_{1,2})(x_{2,1}-x_{2,2})(x_{3,2}-x_{3,1})} \\ \Phi_6 = \frac{(x_1^*-x_{1,2})(x_2^*-x_{2,1})(x_3^*-x_{3,1})}{(x_{1,1}-x_{1,2})(x_{2,2}-x_{2,1})(x_{3,2}-x_{3,1})} \\ \Phi_7 = \frac{(x_1^*-x_{1,1})(x_2^*-x_{2,2})(x_3^*-x_{3,1})}{(x_{1,2}-x_{1,1})(x_{2,1}-x_{2,2})(x_{3,2}-x_{3,1})} \\ \Phi_8 = \frac{(x_1^*-x_{1,1})(x_2^*-x_{2,1})(x_3^*-x_{3,1})}{(x_{1,2}-x_{1,1})(x_{2,2}-x_{2,1})(x_{3,2}-x_{3,1})} \end{cases} \tag{5.18}$$

- la deuxième est effectuée en utilisant une pondération inverse à la distance. Soit $d_k = \|\boldsymbol{x_{IP}} - \boldsymbol{x_k}\|$, avec $k = 1, \cdots, 8$, la distance séparant le point image de ses huit nœuds voisins. L'évaluation de la variable $\varphi(\boldsymbol{x_{IP}})$ est donnée par :

$$\varphi(\boldsymbol{x_{IP}}) = \sum_{k=1}^{8} \varphi_{\mathrm{NP}_k} \Phi_k, \tag{5.19}$$

avec $\Phi_k = d_k^{-2} / \sum_{i=1}^{8} d_i^{-2}$. Plus un nœud est proche du point image I, plus il sera influent dans la pondération.

Pour les deux types d'interpolation, si un des points d'interpolation NP_i pour $i \in [\![1, 8]\!]$ est très proche du point image, nous fixons $\varphi(\boldsymbol{x_{IP}}) = \varphi_{\mathrm{NP}_i}$. Ce cas test pratiquement considéré quand la distance $d_i / \|\boldsymbol{x}_{\mathrm{GP}} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{IP}}\|^2 < \epsilon$ avec $\epsilon = 10^{-10}$ (cf. Figure 5.6(b)). Dans le cas où l'un des points d'interpolation est un point solide, le point IP est confondu avec le point NP_i le plus proche (cf. Figure 5.6(a)).

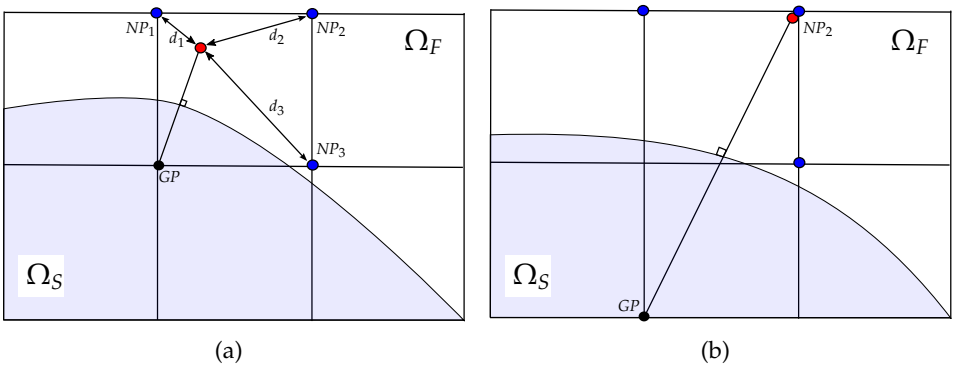


Figure 5.6. *Situation où un des quatre points d'interpolation est confondu avec un point solide (a), situation où un des quatre points d'interpolation est très proche du point image (b).*

Les variables caractéristiques de l'écoulement au niveau des points images IP sont ainsi

évaluées :

$$T_{\mathrm{IP}} = \sum_k \Phi_k T_{\mathrm{NP}_k},\ P_{\mathrm{IP}} = \sum_k \Phi_k \rho_{\mathrm{NP}_k} T_{\mathrm{NP}_k} \mathcal{R}/\mathcal{W}_{\mathrm{NP}_k},\ (Y_\alpha)_{\mathrm{IP}} = \sum_k \Phi_k \cdot (Y_\alpha)_{\mathrm{NP}_k}, \tag{5.20}$$

où Φ_k est l'un des deux coefficients d'interpolation précédemment exposés. Notons ici qu'on aurait pu évaluer directement la valeur de l'énergie totale au niveau du point image, au lieu de la recalculer à partir de son expression. Néanmoins, comme nous avons besoin de réévaluer la température à partir de l'énergie totale pour la résolution de notre système d'équation. En raison de sa simplicité, nous avons préféré calculer directement la température plutôt que de la déduire de l'énergie. La masse volumique ainsi que la masse moléculaire de mélange sont réévaluées en conséquence :

$$\mathcal{W}_{\mathrm{IP}} = \left(\sum_{\alpha=1}^{\alpha=\mathcal{N}_{\mathrm{sp}}} (Y_\alpha)_{\mathrm{IP}}/\mathcal{W}_\alpha \right)^{-1},\ \rho_{\mathrm{IP}} = \frac{P_{\mathrm{IP}}\mathcal{W}_{\mathrm{IP}}}{\mathcal{R}T_{\mathrm{IP}}}. \tag{5.21}$$

Reconstruction des points fantômes : la partie solide ne nécessite aucun traitement particulier ; elle est évaluée seulement à partir des paramètres de l'écoulement de la partie fluide. Nous présentons dans ce paragraphe la procédure qui permet la construction de la partie solide, i.e. les points fantômes. On considère à titre d'exemple un schéma centré d'ordre 2 de la première dérivé d'une variable d'écoulement quelconque φ normale à Γ, on peut écrire ainsi :

$$\left.\frac{\partial \varphi}{\partial n}\right|_{\mathrm{BP}} = \frac{\varphi_{\mathrm{IP}} - \varphi_{\mathrm{GP}}}{2h} + \mathcal{O}(h^2), \tag{5.22}$$

où $h = \|\boldsymbol{x}_{\mathrm{IP}} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{GP}}\|^2$. Par conséquence, la valeur de φ à imposer sur le point fantôme dans ce cas est donnée par :

$$\varphi_{\mathrm{IP}} = \varphi_{\mathrm{GP}} + 2hc, \tag{5.23}$$

où c désigne la valeur de la frontière immergée imposée $\partial\varphi/\partial n|_{\mathrm{BP}}$. La condition de Neumann sera imposée dans la suite de cette thèse sur la condition de non pénétration des espèces, ce qui revient à écrire :

$$\left.\frac{\partial Y_\alpha}{\partial n}\right|_{\mathrm{BP}} = 0. \tag{5.24}$$

La condition d'adiabaticité, quant à elle, s'obtient en écrivant :

$$\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_{\mathrm{BP}} = 0. \tag{5.25}$$

Les deux équations (5.24) et (5.25) permettent de construire les quantités température et fractions massiques des espèces au niveau des points fantômes grâce à l'équation :

$$T_{\mathrm{GP}} = T_{\mathrm{IP}},\ \ (Y_\alpha)_{\mathrm{GP}} = (Y_\alpha)_{\mathrm{IP}}. \tag{5.26}$$

En ce qui concerne la condition frontière de Dirichlet, la valeur de la variable φ est obtenue à partir de l'expression :

$$\varphi_{\mathrm{GP}} = 2\varphi_{\mathrm{BP}} - \varphi_{\mathrm{IP}}, \tag{5.27}$$

qui traduit le fait que le gradient de la variable φ à l'interface reste identique lorsqu'il est évalué de chaque côté de l'interface. Notons que la prolongation du gradient à travers l'interface n'a pas de sens physique en soit, il s'agit d'un outil numérique permettant d'imposer la bonne condition à l'interface en utilisant les premiers points solides juxtaposant l'interface. Mathématiquement, ceci signifie l'égalité de la forme discrète de l'approximation de la dérivé à l'ordre 1 à droite et à gauche de l'interface Γ :

$$\frac{\varphi_{\mathrm{BP}} - \varphi_{\mathrm{GP}}}{h} = \frac{\varphi_{\mathrm{IP}} - \varphi_{\mathrm{BP}}}{h}. \tag{5.28}$$

Une paroi isotherme à température T_{wall} peut ainsi être imposée en écrivant :

$$T_{\mathrm{GP}} = 2T_{\mathrm{wall}} - T_{\mathrm{IP}} \tag{5.29}$$

Finalement, l'application de la méthode GPM pour la correction de l'équation d'énergie et la conservation des espèces est réalisée en imposant en chaque point fantôme :

$$\rho_{\mathrm{GP}} = \rho_{\mathrm{IP}} \tag{5.30}$$

$$\rho_{\mathrm{GP}}\,(Y_\alpha)_{\mathrm{IP}} = \rho_{\mathrm{IP}}(Y_\alpha)_{\mathrm{IP}}, \quad \alpha = 1, \cdots, \mathcal{N}_{\mathrm{sp}} \tag{5.31}$$

$$\rho_{\mathrm{GP}}\, e_{\mathrm{GP}} = \rho_{\mathrm{IP}} h_{\mathrm{IP}} - P_{\mathrm{IP}} + \rho_{\mathrm{IP}} \frac{\boldsymbol{u}_{\mathrm{IP}} \cdot \boldsymbol{u}_{\mathrm{IP}}}{2}, \tag{5.32}$$

où h_{IP} désigne l'enthalpie du point image évaluée en utilisant la chaleur spécifique à pression constante du mélange $c_p = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\mathrm{sp}}} (Y_\alpha)_{\mathrm{IP}} \cdot c_{p,\alpha}(T_{\mathrm{IP}})$. L'équation (5.30) traduit la conservation de la masse. La deuxième équation (5.31) est associée à la contrainte de non-pénétration des espèces à travers la paroi. Et finalement, la troisième équation (5.32) représente la conservation de l'énergie totale, elle est utilisée pour imposer une paroi adiabatique ou bien isotherme.

5.1.5 Procédure du couplage

La présente stratégie de frontières immergées combine la méthode PVM (section §5.1.3) et GPM (section §5.1.4) suivant l'algorithme 1.

5.2 Validation de la méthode IBM développée

Dans cette section, nous présentons des résultats numériques dédiées à la validation de la méthode de frontières immergées développée. La méthode sera testée sur des cas bidimensionnels et tridimensionnels dans un second temps. Ces cas sont en régime laminaire

Algorithm 1 Procédure de couplage de la méthode frontières immergées.

1: Déterminer le statut de chaque point de maillage solide Ω_S ou fluide Ω_F
2: Chercher le support d'interpolation pour la méthode PVM (voir Figure 5.4)
3: Déterminer les points fantômes Ω_{GP} et les points images Ω_{IP}
4: Estimer le champ de vitesse aux points Lagrangien de l'interface fluide/solide selon l'équation (5.11)
5: Calculer les variables conservatives mises à jour en ajoutant le terme source $f^L(x)$ (équation (5.12)) aux équations de quantité de mouvement à chaque étape de Runge-Kutta

ou turbulent. L'objectif est de valider la méthode développée sur une série de cas test et de montrer sa capacité à simuler des écoulements autour d'objets de différentes géométries. Il n'est pas de produire une étude physique profonde sur chaque cas test.

5.2.1 Plaque plane subsonique

Pour ce premier cas test de validation, nous cherchons à valider l'établissement de la couche limite sur un une plaque plane. Nous comparons la solution obtenue par le biais de notre méthode à la solution théorique largement documentée pour un écoulement laminaire sans gradient de pression (solution de *Blasius*). Le cas étudié s'inspire d'une étude similaire présentée par Bobenrieth Miserda *et al.* [20]. La configuration étudiée correspond à un écoulement subsonique autour d'une plaque plane à incidence nulle. Le nombre de Reynolds basé sur la longueur de la plaque L est $Re = LU_\infty/\nu = 250$. Le choix de ce nombre de Reynolds empêche la transition au régime turbulent le long de la plaque. Le domaine rectangulaire de calcul présente une longueur caractéristique de $4.5L$ (avec $L = 70$ mm) et une largeur de $9L$ et un rapport entre la longueur L et l'épaisseur de la plaque e est approximativement égal 70 (cf. Figure 5.7) et discrétisé avec un maillage non uniforme (raffiné autour de la plaque plane) comportant $N_{x_1} \times N_{x_2} = 1700 \times 600$ points. Le bord d'attaque de la plaque est fixé au point $(0,0)$ et le domaine est étendu avant la plaque jusqu'à $x_1 = -2.5L$ et après la plaque jusqu'à $x_1 = 1L$ afin d'éviter toute interaction entre la condition d'entrée et la condition du mur adiabatique sur la plaque. Le nombre total de points Lagrangiens retenus pour décrire la plaque plane est approximativement 2040.

Sur la Figure 5.8 sont superposés des profils adimensionnés de vitesse longitudinale à plusieurs abscisses x_1 en fonction de la cordonnée spatiale sans dimension $\eta = x_2/\beta(x_1)$, où $\beta(x_1) = x_1 Re_{x_1}^{1/2}$ et $Re_{x_1} = U_\infty x_1/\nu$. On remarque que, plus on s'éloigne en aval du bord d'attaque de la plaque plane, plus les profils se rapprochent de la solution analytique de *Blasius*. La deuxième comparaison effectuée porte sur l'évolution du coefficient de friction $C_f = 2\tau_p/(\rho U_\infty^2)$, où $\tau_p = (\mu \partial u_1/\partial x_2)|_{x_2=0}$, le long de la plaque. Les résultats de la simulation sont comparés à la loi de *Blasius* donnée par $C_f \approx 0.644/\sqrt{Re_{x_1}}$. Les résultats numériques et théoriques sont présentés sur la Figure 5.9. Le coefficient de friction C_f est maximum au bord d'attaque et diminue rapidement en se stabilisant le long de la plaque. La concordance entre la solution obtenue avec la modélisation de la paroi adiabatique par la présente méthode

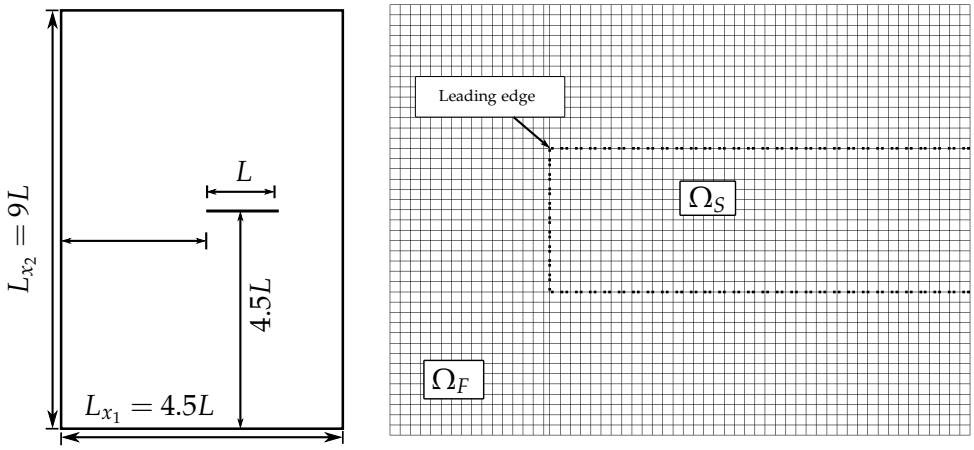


Figure 5.7. *Configuration du cas test de plaque plane (gauche), une visualisation du maillage Lagrangien de la plaque plane (droite).*

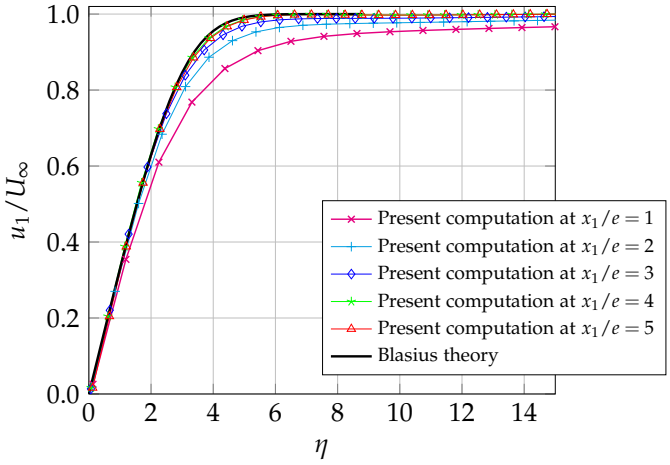


Figure 5.8. *Profils autosimilaires de vitesse longitudinale sur chaque abscisse x_1.*

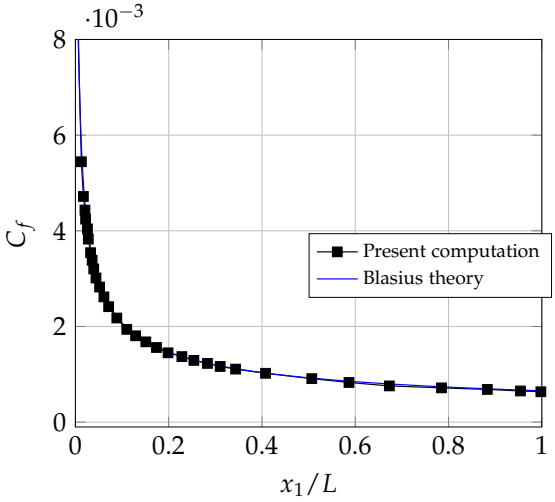


Figure 5.9. *Profils du coefficient C_f le long de la plaque plane.*

d'*IBM* et les prévisions de la théorie asymptotique de *Blasius* est excellente et les deux courbes se superposent presque complètement.

La Figure 5.10 présente le champ de la variable $\beta_M = \|\nabla M\|^{1/20}$ avec M le nombre de Mach. Cette variable offre la possibilité d'une bonne visualisation du développement

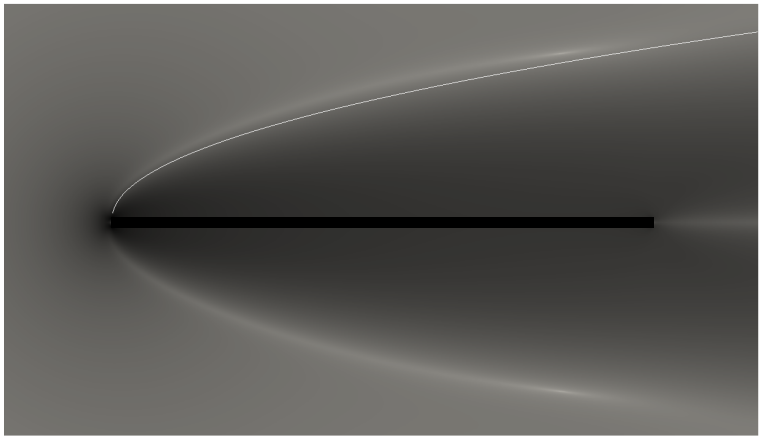


Figure 5.10. *Développement de la couche limite avec la variable β_M. La ligne blanche représente la solution théorique de Blasius δ.*

de la couche limite. Nous avons également superposé sur la même Figure 5.10, avec la ligne blanche, l'évolution de la solution théorique de la couche limite donnée par $\delta = 5x_1 R_{x_1}^{1/2} = 5\beta(x_2)$. Comme attendu par la théorie de Blasius, l'épaisseur de la couche limite augmente paraboliquement en se déplaçant dans le sens de l'écoulement (à la distance du bord d'attaque).

5.2.2 Écoulements autour d'un cylindre

Nous considérons un écoulement autour d'un cylindre bidimensionnel comme illustré sur la Figure 5.11. Cet écoulement fournit un modèle d'écoulement autour d'obstacles profilés ou non. Ce cas test présente une grande complexité en terme de topologie de l'écoulement. Il préserve également le potentiel instable des régions où la turbulence est générée. Ces régions sont la couche limite sur l'obstacle, la couche de cisaillement délimitant la région de recirculation et le sillage. Le comportement de l'écoulement dans le sillage dépend de l'état de ces régions qui peut être laminaire, transitoire ou turbulent. L'écoulement autour d'un cylindre dépend uniquement du nombre de Reynolds défini par $Re = U_\infty d/\nu$, où U_∞ est la vitesse du fluide en amont et ν la viscosité cinématique du fluide considéré. Nous rappelons que ce nombre adimensionnel caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. Nous allons considérer deux cas bien documentés ; le premier concerne un écoulement subsonique à faible nombre de Reynolds, et l'autre sera consacré à étudier un écoulement supersonique à grand nombre de Reynolds.

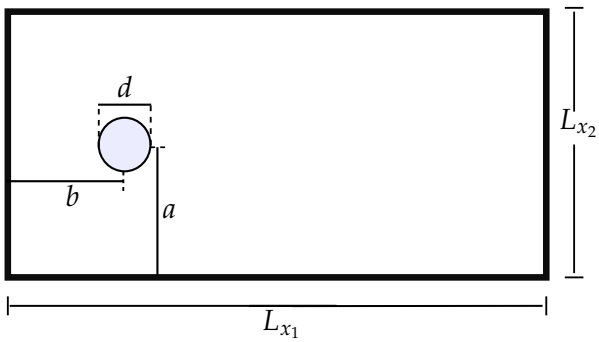


Figure 5.11. *Illustration du domaine de calcul pour l'écoulement autour du cylindre.*

Les détails géométriques de chacun des deux cas sont présentés dans le Tableau 5.1. Dans les deux cas, les longueurs suivant les deux directions x_1 et x_2 sont choisies suffisamment grandes afin de minimiser l'effet parasite des conditions frontières.

Tableau 5.1 *– Caractéristiques (en mm) du domaine de calcul définies sur la Figure 5.11.*

Écoulement	a	b	L_{x_1}	L_{x_2}
subsonique	12.5d	15d	45d	24d
supersonique	3d	2d	25d	6d

5.2.2.1 Écoulements subsonique autour d'un cylindre à faible nombre de Reynolds

Le champ de vitesse fluide est uniforme en entrée, imposé par le nombre de Reynolds régissant l'écoulement $U_\infty = Re.\nu/d$. L'écoulement en amont du cylindre est laminaire. Des conditions de mur glissant sont imposées sur les faces supérieure et inférieure du domaine, tandis qu'une condition de sortie est employée à la sortie. Le fluide considéré est l'air (N_2 et O_2) à la pression $P_\infty = 1$ atm et à la température $T_\infty = 300$ K. Une condition de non-glissement et d'adiabaticité est imposée sur la paroi du cylindre modélisée par 80 points Lagrangiens. Le pas de temps Δt est choisi de manière à obtenir un nombre CFL égal à 0.5. Le domaine de calcul est discrétisé avec $N_{x_1} \times N_{x_2} = 601 \times 156$ points. Le maillage est raffiné dans la zone de cylindre puis relâché loin de cette zone (cf. Figure 5.12). Une vue détaillée du maillage Lagrangien modélisé par 80 points est présentée sur la Figure 5.13. Nous allons effectuer cinq simulations couvrant les nombres de Reynolds $Re = 10, 20, 40, 100$ et 300. Les trois premières simulations correspondent au cas où deux tourbillons symétriques se forment derrière le cylindre. La troisième simulation se situe dans le régime où un détachement périodique de deux tourbillons contra-rotatifs est observé et se trouve dans la gamme du régime laminaire instationnaire bidimensionnel. La dernière simulation est caractérisée par de effets tri-dimensionnels plus prononcés.

La Figure 5.14 montre les lignes de courant une fois l'état stationnaire est atteint pour $Re = 10, 20$ et 40. Comme prévu, on observe qu'une paire de tourbillons stationnaires attachés apparaissent derrière le cylindre aux nombres de Reynolds considérés. La longueur caractéristique du sillage l (la distance entre le point le plus en arrière du cylindre et la fin du sillage) et l'angle de séparation θ_s des tourbillons sont mesurés et reportés dans le Tableau 5.2. Ces deux quantités sont comparées avec des résultats numériques et expérimentaux de la littérature. Les résultats correspondant à nos simulations basées sur la modélisation du cylindre par la méthode d'IBM développée sont en bon accord avec les résultats des études précédentes pour les trois nombres de Reynolds considérés. En outre, le coefficient de traînée C_D et les coefficients de pression de stagnation en amont $C_p(\pi)$ et en aval $Cp(0)$ du cylindre sont également évalués lorsque l'état stationnaire est établi. Comme le montre le Tableau 5.3, ces paramètres concordent bien avec les résultats des études précédentes.

Le coefficient de traînée C_D et les coefficients de pression de stagnation en amont $C_p(\pi)$

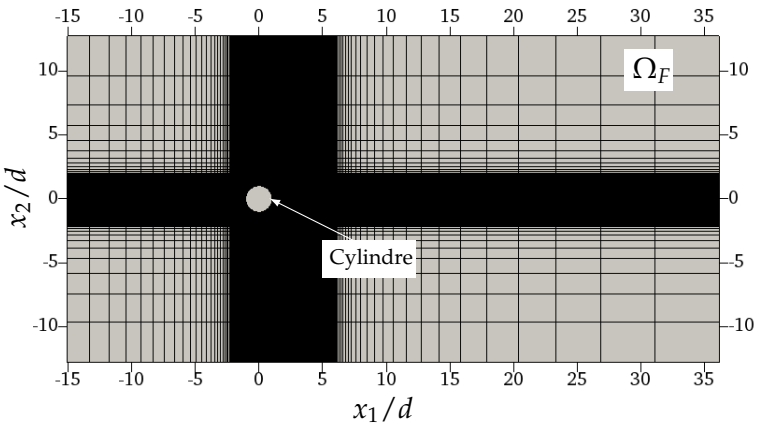


Figure 5.12. *Vue générale du maillage Cartésien ($N = N_{x_1} \times N_{x_2} = 601 \times 156$).*

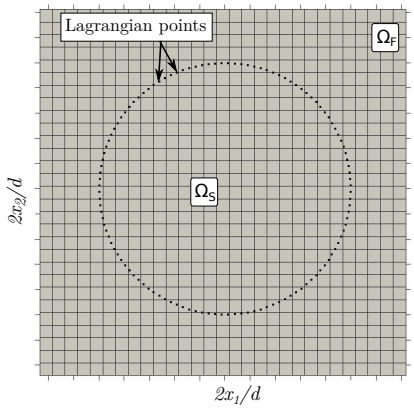


Figure 5.13. *Vue détaillée du maillage Lagrangien.*

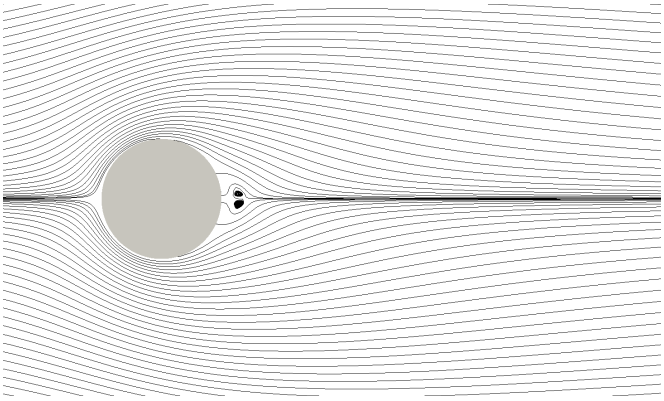
	$Re = 10$		$Re = 20$		$Re = 40$	
	l	θ_s	l	θ_s	l	θ_s
Mei et Shyy (1998) [186]	0.996	30.00	3.608	42.10	8.760	50.12
He et Luo (1997) [115]	0.948	26.89	3.684	42.90	8.980	50.84
Nieuwstadt et Keller (1973) [195]	0.868	27.96	3.572	43.37	8.714	53.34
Présente méthode	0.968	28.05	3.664	43.72	8.522	53.16

Tableau 5.2 *– Comparaison des paramètres géométriques de l'écoulement autour du cylindre pour $Re = 10,\ 20$ et 40.*

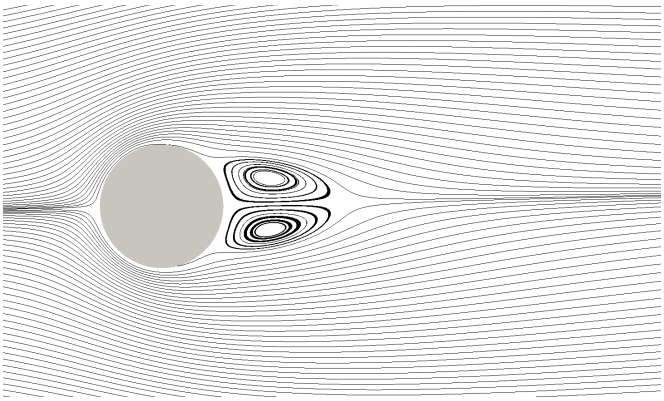
et en aval $Cp(0)$ du cylindre sont également évalués lorsque l'état stationnaire est établi. Comme le montre le Tableau 5.3, ces paramètres concordent bien avec les résultats des études précédentes.

	$Re = 10$			$Re = 20$			$Re = 40$		
	C_D	$C_P(0)$	$C_P(\pi)$	C_D	$C_P(0)$	$C_P(\pi)$	C_D	$C_P(0)$	$C_P(\pi)$
Nieuwstadt et Keller (1973) [195]	2.828	−0.692	1.500	2.053	−0.582	1.274	1.550	−0.554	1.117
He et Luo (1997) [115]	3.170	−0.697	1.393	2.152	−0.567	1.233	1.499	−0.487	1.133
Présente méthode	2.988	−0.665	1.470	2.070	−0.550	1.265	1.522	−0.452	1.135

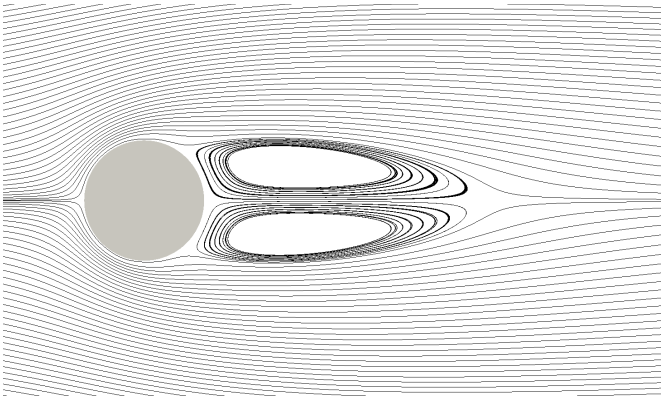
Tableau 5.3 *– Comparaison des paramètres dynamique de l'écoulement autour du cylindre pour $Re = 10, 20$ et 40.*



(a) $Re = 10$



(b) $Re = 20$



(c) $Re = 40$

Figure 5.14. *Lignes de courant pour* $Re = 10,\ 20$ *et* 40.

On note, dans le cas d'un écoulement subsonique, la formation d'un écoulement "miroir" à l'intérieur du cylindre où le champ de vorticité se développe en créant deux tourbillons permettant la continuité des dérivés de vitesse, comme en témoigne la Figure 5.15.

Dans le cas $Re = 300$, l'évolution temporelle du champ de vorticité est illustrée sur la Figure 5.16. En une période, un tourbillon apparaît de chaque côté du cylindre, provoquant la naissance d'une allée tourbillonnaire de Von-Kármán avec des tourbillons ayant presque la même taille et intensité.

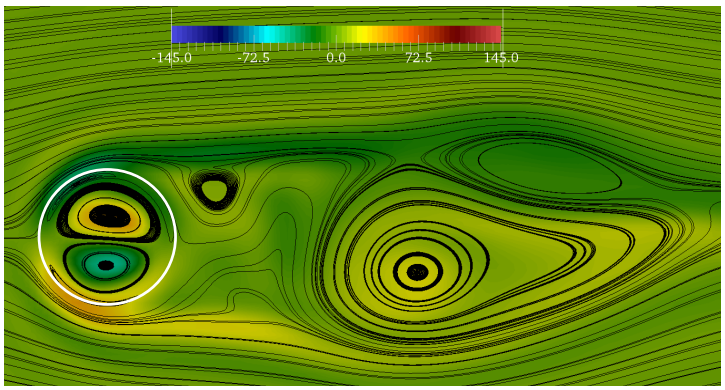


Figure 5.15. *Champ de vorticité superposé aux lignes de courant pour $Re = 100$ à $tU_\infty/d = 2.25$.*

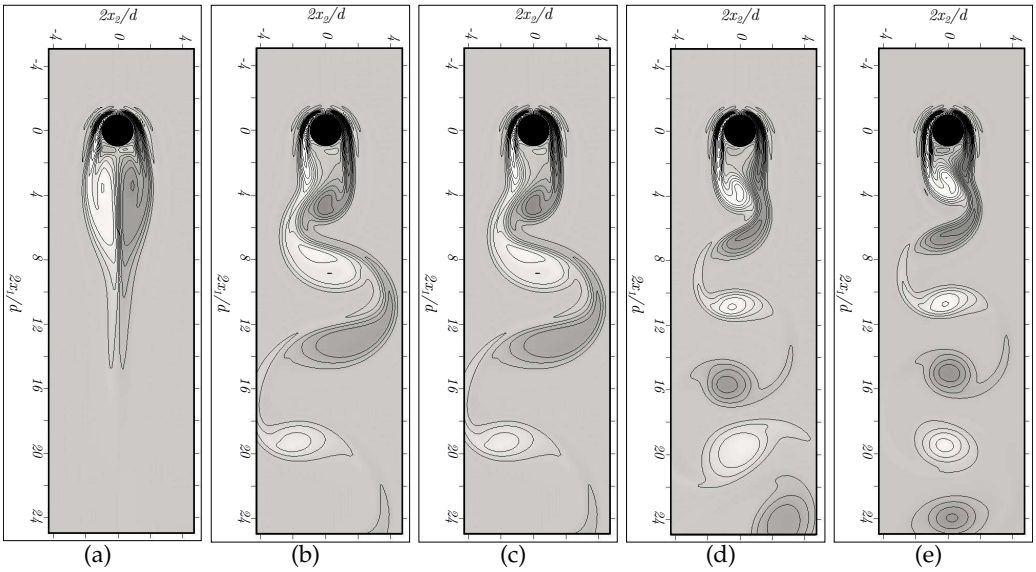


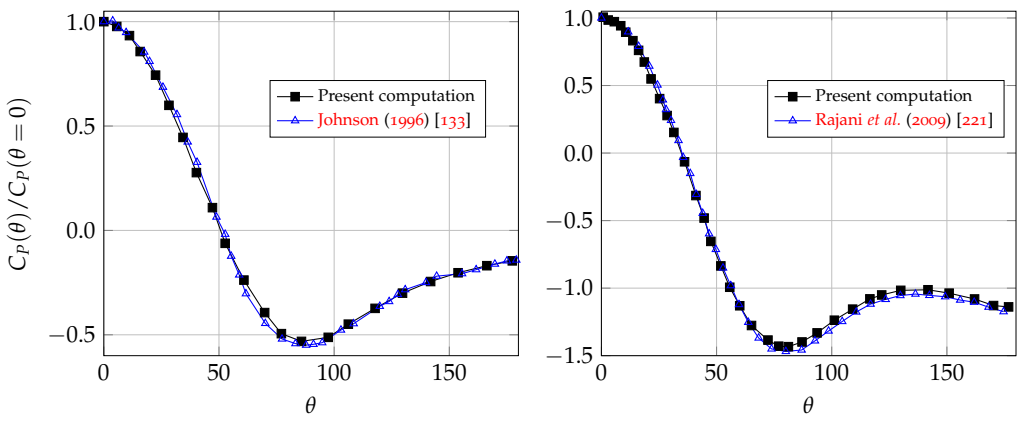
Figure 5.16. *Contours de vorticité à $tU_\infty/d = 11.9$(a), 23.8(b), 29.8(c), 35.7(d), et 83.4(e) pour $Re = 300$*

La distribution du coefficient de pression $C_P(\theta) = 2(P(\theta) - P_\infty)/(\rho U_\infty^2)$, où θ est la coordonnée azimutale sur le cylindre, en fonction de θ pour les cas $Re = 100$ et 300 est reportée dans la Figure 5.17. Les résultats de simulation sont comparés aux résultats numériques de Rajani *et al.* (2009) [221] et Johnson (1996) [133]. Nous trouvons que les résultats obtenus par voie de simulation sont en bon accord avec ceux de la littérature.

A partir des champs de vitesse et pression calculés, les coefficients de portance $C_d = 2F_{x_1}/(\rho U_\infty^2 d)$, de traînée $C_L = 2F_{x_2}/(\rho U_\infty^2 d)$ et le nombre de Strouhal $St = df/U_\infty$ sont également évalués. Dans ces définitions, f désigne la fréquence de lâché tourbillonnaire derrière le cylindre, et la force exercée sur le cylindre par le fluide $\boldsymbol{F} = (F_{x_1}, F_{x_2})$, où F_{x_1} et F_{x_2} désignent respectivement sa composante longitudinale et transversale, est définie par :

$$\boldsymbol{F} = -\frac{d}{2}\int_0^{2\pi} \tau_{i,j} n_i d\theta \tag{5.33}$$

Le Tableau 5.4 présente un comparatif de ces trois coefficients obtenus par la présente méthode et des résultats rapportés dans la littérature. L'ensemble de nos résultats s'intègre



(a) $Re = 100$ (b) $Re = 300$

Figure 5.17. *Distribution du coefficient de pression sur le cylindre en fonction de θ normalisé par $C_P(\theta = 0)$ pour $Re = 100$ (a) et $Re = 300$ (b).*

bien dans la gamme de valeurs issues dans la littérature.

	C_L		C_d		St	
	$Re = 100$	$Re = 300$	$Re = 100$	$Re = 300$	$Re = 100$	$Re = 300$
Rajani *et al.* [221]	0.17	0.60	1.33	1.28	0.15	0.21
Ghias *et al.* [91]	0.32	0.67	1.36	1.40	0.16	0.21
Lima E Silva *et al.* [163]	-	-	1.39	1.27	0.16	0.20
Ding *et al.* [62]	0.28	-	1.35	-	0.16	-
Présente méthode	0.25	0.62	1.36	1.26	0.16	0.21

Tableau 5.4 *– Comparaison des coefficients de traînée, de portance et du nombre de Strouhal avec la littérature.*

5.2.2.2 Écoulements supersonique autour d'un cylindre à grand nombre de Reynolds

Contrairement au cas subsonique, l'écoulement supersonique autour du cylindre présente des structures caractéristiques et un comportement du fluide très différents. Des ondes de choc apparaissent. Elles sont associées à des variations brutales des propriétés de l'écoulement, en particulier de la vitesse normale du choc, de la pression et de la température. Nous allons reprendre ici l'étude de Chaudhuri *et al.* [48] où le cylindre est placé dans un écoulement supersonique à Mach 3.5. Le nombre de Reynolds basé sur le diamètre du cylindre est $Re \approx 10^6$. Des conditions de mur glissant sont imposées sur les faces inférieure et supérieure et une condition de sortie est utilisée à la sortie. Cinq niveaux de maillage, sans raffinement autour du cylindre, sont considérés afin d'évaluer l'ordre de convergence de la méthode (voir Tableau 5.5). Pour chaque maillage, nous définissons une taille de maille caractéristique de maillage $\Delta_h = \sqrt{\Delta x_{1,h} \Delta x_{2,h}}$ où $\Delta x_{i,h} = L_{x_i} / N_{x_{i,h}}$ pour $h = 0, \cdots, 4$. Le niveau de résolution de chaque maillage est quantifié par $N_h = \sqrt{N_{x_{1,h}} N_{x_{2,h}}}$.

Maillage	N_{x_1}	N_{x_2}	Nombre total de points
M_1	2^8	2^6	0.016
M_2	2^9	2^7	0.065
M_3	2^{10}	2^8	0.262
M_4	2^{11}	2^9	1.048
M_5	2^{12}	2^{10}	4.194

Tableau 5.5 *– Maillage utilisé pour l'évaluation de la convergence. Le nombre total de points est donnée en million de points (MP).*

Si le choc est normal, l'écoulement devient subsonique, mais pour un choc oblique, seule la composante normale au choc de la vitesse diminue à travers le choc, et donc l'écoulement résultant peut rester supersonique. La topologie obtenue se présente alors sous forme de structures dites "en losanges" (diamond shock pattern), caractéristique des jets supersoniques, comme le montre le champ de la topologie de masse volumique, de vitesse longitudinale, de vitesse transversale, de température et de pression de la Figure 5.18.

En s'inspirant des techniques expérimentales de visualisation (*Schlieren*), on reproduit un *Schlieren* numérique à partir du champ de gradient de masse volumique suivant l'expression :

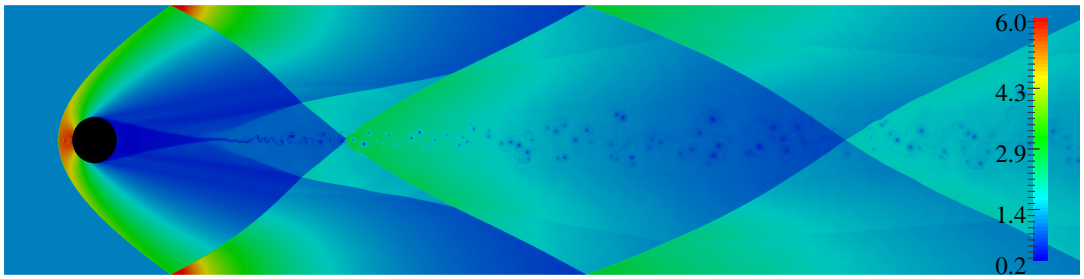
$$S_\rho = \alpha \exp\left(-\beta \sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_2}\right)^2} \left(\max \sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_2}\right)^2}\right)^{-1}\right) \tag{5.34}$$

Le choix de α et β déterminent la cascade de coloration du noir vers le blanc et l'amplification des petits gradients afin qu'ils soient bien affichés. Dans le cadre de cette thèse, nous avons retenu les mêmes valeurs que Quirk [220] et Hadjadj et Kudryavtsev [111], à savoir $\alpha = 1$ et $\beta = 5$. La présence du choc détaché en amont du cylindre comportant un bord d'attaque arrondi, ainsi que le sillage du cylindre interagissant avec les ondes de choc est bien visible.

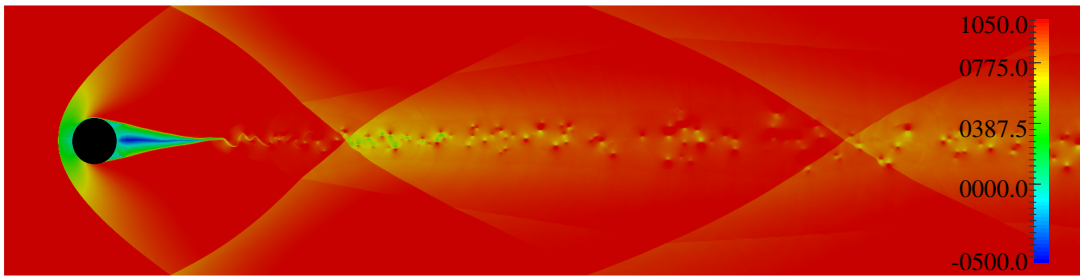
Nous étudions en détail les propriétés locales du premier choc, et en particulier, la loi $\theta - \beta - M$. Cette loi se traduit par une relation liant l'angle θ de déflexion de l'écoulement à travers un choc oblique à l'angle β du choc oblique pour un nombre de Mach donné (voir Figure 5.20). Cette relation est donnée par :

$$\tan(\theta) = 2\cot(\beta)\left[\frac{M^2 \sin^2\beta - 1}{M^2(\gamma + \cos(2\beta)) + 2}\right], \tag{5.35}$$

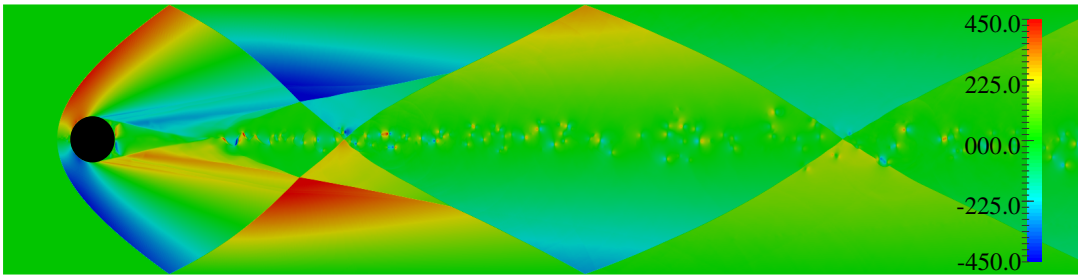
Les résultats pour les différents maillages sont reportés sur la Figure 5.21 et comparés aux résultats numériques de Chaudhuri *et al.* [48] et à l'expression théorique (5.35). Malgré une certaine dispersion autour de la solution analytique, nos simulation obtenues sur différents maillages sont en bon accord avec les données de référence, et nous remarquons également que, plus le maillage est raffiné, plus l'accord avec la solution analytique est bon, et ce malgré



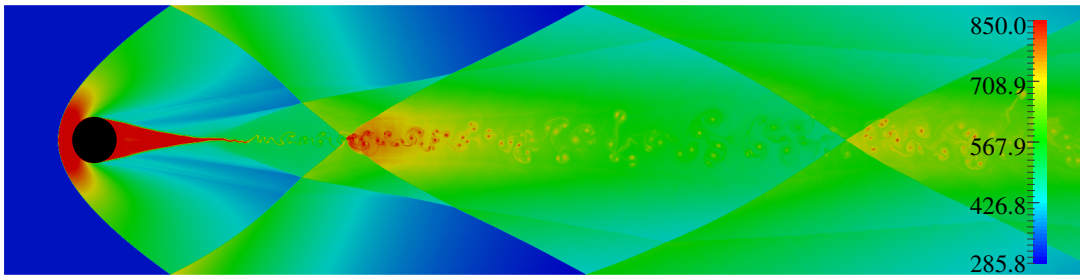
(a) ρ



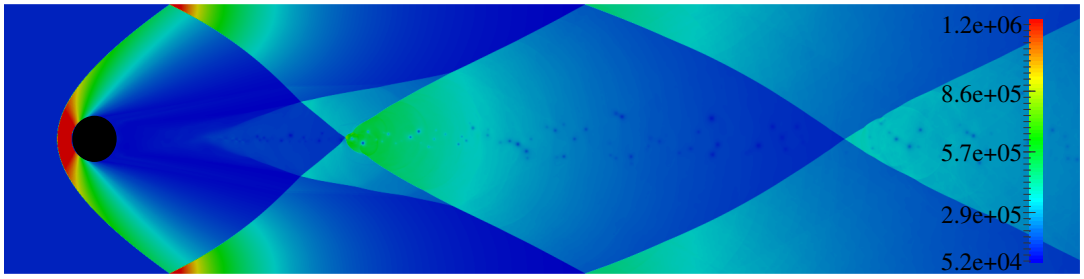
(b) u_1



(c) u_2



(d) T



(e) P

Figure 5.18. *Champ de ρ, u_1, u_2, T et P pour l'écoulement supersonique autour du cylindre obtenu avec la résolution de maillage M_4.*

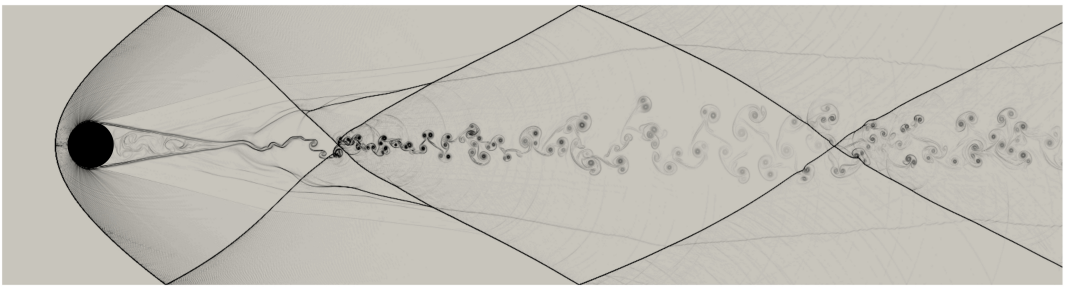


Figure 5.19. *Schlieren de masse volumique pour l'écoulement supersonique autour du cylindre obtenu avec la résolution de maillage M_4.*

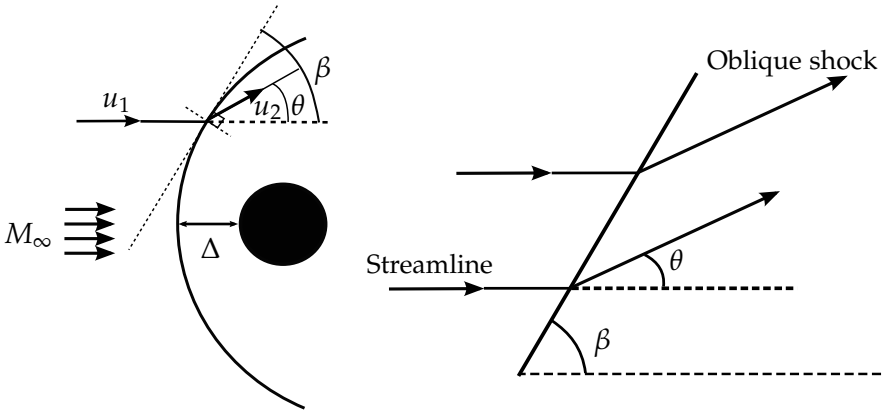


Figure 5.20. *Esquisse du choc courbe (droite) et des angles associés (gauche).*

le fait que le rapport des capacités massiques γ soit variable dans notre solveur CREAMS, alors que nos résultats sont comparés à un cas $\gamma = 1.4$.

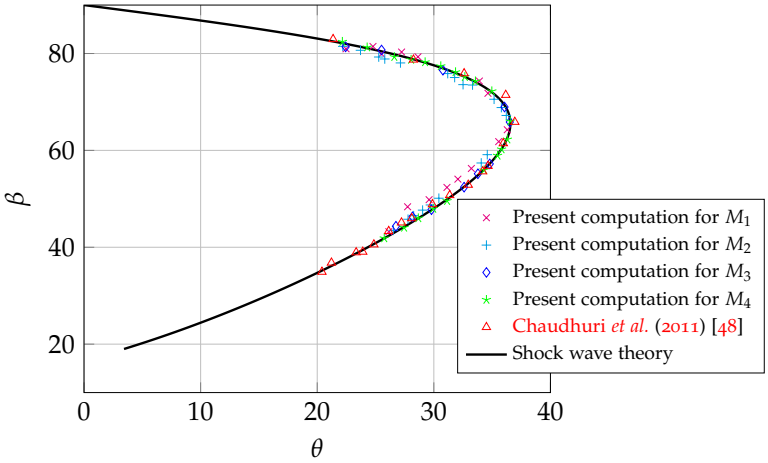


Figure 5.21. *Relation $\theta - \beta$ pour $M = 3.5$ pour l'écoulement supersonique pour différents maillages et comparaison avec la théorie.*

La distance du choc détaché par rapport au cylindre, notée Δ, dépend uniquement du diamètre d et du nombre de Mach, selon la relation de Billig [18] :

$$\frac{\Delta}{d} = \lambda_1 \exp\left(\frac{\lambda_2}{M_\infty^2}\right), \tag{5.36}$$

avec $\lambda_1 = 0.193$ et $\lambda_2 = 4.67$. Le Tableau 5.6 compare les résultats obtenus par les présentes simulations et pour quatre maillages avec ceux obtenus numériquement par Chaudhuri

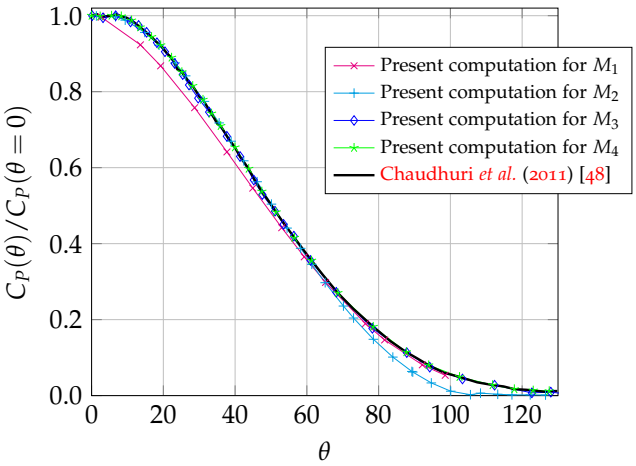


Figure 5.22. *Distribution de $C_P(\theta)$ moyen sur le cylindre en fonction de θ normalisé par $C_P(\theta=0)$ pour l'écoulement supersonique.*

et al. [48]. Les résultats sont en bon accord et s'approchent de la formule analytique d'autant plus que le maillage est raffiné.

	M_1	M_2	M_3	M_4	$\lambda_1 \exp(\lambda_2/M_\infty^2)$
Chaudhuri *et al.* (2011) [48]	0.34	0.33	0.31	0.30	0.29
Présente méthode	0.32	0.31	0.30	0.29	0.29

***Tableau 5.6** – Distance du choc détaché par rapport au cylindre pour les maillage M_i, $i = 1,2,3,4$.*

Le coefficient de pression $C_p(\theta)$ est calculé pour les maillage M_i, $i = 1,2,3,4$. Les résultats correspondant sont reportés dans la Figure 5.22. Un bon accord est trouvé avec les résultats de Chaudhuri *et al.* [48]. Il est à noter que la distribution est indépendante de la densité de maillage à partir de M_3. L'étude de convergence consiste à comparer les différences obtenues pour différents maillages, entre la solution fournie par le solveur et la solution analytique associée au problème considéré. Or, la complexité de la topologie de l'écoulement dans le sillage du cylindre, comprenant entre autres les chocs et les interactions complexes entre les tourbillons, rend la tâche d'évaluer l'ordre de convergence de la présente méthode de frontière immergées délicate. Comme il n'existe pas de solution analytique pour ce problème, nous considérons la solution évaluée sur un maillage raffiné comme solution de référence. La solution raffinée correspondra à la solution évaluée pour le maillage M_4. Le pas de temps choisi pour l'ensemble des simulations est le pas de temps le plus petit obtenu pour le calcul préalable que nous avons réalisé sur le maillage M_4. Nous calculons les erreurs L_2 et L_∞ intégrées sur les valeurs ponctuelles aux points de maillage pour une quantité ϕ donnée par :

$$\mathcal{E}_2^{M_h} = \sqrt{\frac{1}{(N_{x_{1,h}} \times N_{x_{2,h}})} \sum_{i=1}^{N_{x_{1,h}}} \sum_{j=1}^{N_{x_{2,h}}} \left(\phi_{i,j}^{M_h} - \phi_{i,j}^{M_4}\right)^2}, \tag{5.37}$$

et :

$$\mathcal{E}_\infty^{M_h} = \max \left|\phi_{i,j}^{M_h} - \phi_{i,j}^{M_4}\right|. \tag{5.38}$$

Quel que soit le type de norme adopté, nous pouvons supposer que $\mathcal{E}^{M_h} = C.(\Delta_h)^q$, où q

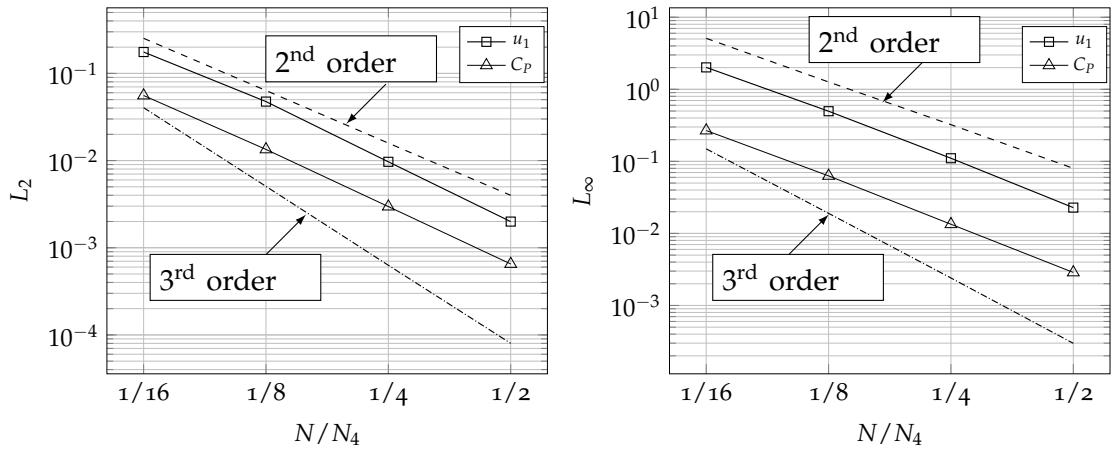
représente l'ordre de convergence et C une constante [199]. Le taux de décroissance d'erreur $\mathcal{E}^{M_h}/\mathcal{E}^{M_{h+1}}$ est lié au rapport de raffinement du maillage $r = \Delta_h/\Delta_{h+1}$ par :

$$\frac{\mathcal{E}^{M_h}}{\mathcal{E}^{M_{h+1}}} = \left(\frac{\Delta_h}{\Delta_{h+1}}\right)^q = \left(\frac{N_{h+1}}{N_h}\right)^q = r^q. \tag{5.39}$$

L'ordre de convergence peut donc s'écrire :

$$q = \log\left(\frac{\mathcal{E}^{M_h}}{\mathcal{E}^{M_{h+1}}}\right) / \log(r), \tag{5.40}$$

où $r = 2$ dans cette étude. La Figure 5.23 montre que nous obtenons un ordre global de convergence pour la présente méthode de frontières immergées couplée au solveur CREAMS légèrement supérieur à 2 pour la vitesse longitudinale u_1 et le coefficient de pression $C_P(\theta)$, voir le Tableau 5.7 pour plus de détails concernant l'étude de convergence.



(a) (b)

Figure 5.23. *Courbes de décroissance de l'erreur en norme L_2 (a) et L_∞ (b) pour les composantes de vitesse longitudinale u_1 et le coefficient de pression $C_p(\theta)$.*

		C_P				u_1			
N_h	Δ_h	L_2	q_2	L_∞	q_∞	L_2	q_2	L_∞	q_∞
256	2^8	0.013378	-	0.06174	-	0.46607	-	0.48638	-
512	2^9	0.002951	2.23	0.01316	2.23	0.09484	2.29	0.10883	2.16
1024	2^{10}	0.000637	2.21	0.00278	2.24	0.01947	2.28	0.02194	2.31

***Tableau 5.7** – Erreurs au sens des normes L_2 et L_∞ et l'ordre de convergence correspondant à u_1 et C_P.*

5.2.2.3 Évaluation de la conservation globale de la masse

Nous allons utiliser ce dernier cas test pour évaluer les performances de la méthode de frontières immergées en termes de conservation de masse. Pour ce faire, nous considérons la configuration représentée sur la Figure 5.24. Il consiste à conduire séparément deux simulations numériques ($\mathcal{S}_1$) et ($\mathcal{S}_2$). La condition d'entrée du deuxième domaine de calcul sans le cylindre est identique à la condition de sortie du premier calcul avec la présence du cylindre. Ceci permet d'avoir un débit massique $\dot{m}_1^{\text{out}}$ obtenu à la sortie de la première simulation numérique strictement égal (c'est-à-dire jusqu'à la précision de la machine) au débit massique $\dot{m}_2^{\text{in}}$ mis à l'entrée du deuxième domaine de calcul. En termes de domaine de calcul et de conditions aux limites associées, les caractéristiques de la simulation ($\mathcal{S}_1$) sont les mêmes que celles examinées dans la section précédente consacrée à l'analyse d'un écoulement supersonique interagissant avec un cylindre circulaire. Les paramètres de simulation retenus pour la simulation ($\mathcal{S}_2$) sont exactement les mêmes sauf qu'il n'y a pas de frontière immergée.

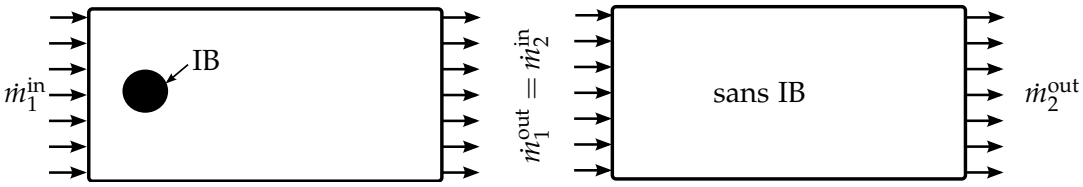


Figure 5.24. *Schématisation des deux domaines de calcul pour l'évaluation de la conservation globale de masse*

On introduit le rapport de conservation de masse pour chaque simulation par l'intermédiaire des deux variables $\eta_1 = \dot{m}_1^{out}/\dot{m}_1^{\text{in}}$ et $\eta_2 = \dot{m}_2^{\text{out}}/\dot{m}_2^{\text{in}}$, où $\dot{m}_1^{\text{in}}$ et $\dot{m}_1^{\text{out}}$ (resp. $\dot{m}_2^{\text{in}}$ et $\dot{m}_2^{\text{out}}$) sont les débits massiques calculés à l'entrée et à la sortie du premier (ou deuxième) domaine de calcul. Nous définissons également deux rapports globaux supplémentaires de conservation de masse $\eta_T = \dot{m}_2^{\text{out}}/\dot{m}_1^{\text{in}}$ et $\eta_R = \eta_1/\eta_2$. Puisque $\dot{m}_1^{\text{out}} = \dot{m}_2^{\text{in}}$, il est facile de montrer que la première quantité est donnée par $\eta_T = \eta_1 \times \eta_2$. Si le solveur `CREAMS` Navier-Stokes est capable de maintenir une parfaite conservation de masse, alors $\eta_2 = 1$ et $\eta_R = \eta_T = \eta_1$. En pratique, $\eta_2 < 1$ la valeur de η_R sera donc retenue comme la métrique pertinente pour discriminer seulement la performance de conservation de masse de la méthode d'`IBM`.

L'évolution temporelle de η_R est représentée sur la Figure 5.25 qui rapporte à la fois les valeurs obtenues avec le présent algorithme et celles issues de la méthode "Ghost-Point" standard. Le cas test permet d'étudier le niveau de conservation de masse globale sur l'ensemble du domaine. A l'état d'équilibre, c'est-à-dire pour le temps t dans l'intervalle $[10t_{\text{ref}}, 50t_{\text{ref}}]$, une valeur moyenne de η_R approximativement égale à 0.997 est obtenue avec notre algorithme de frontières immergées : la perte totale de masse ne dépasse pas 0.3%. Comme le montre la Figure 5.25, cela correspond à une légère amélioration (de l'ordre de 1,5%) par rapport à l'utilisation de l'approche standard `GPM`. Les résultats représentés sur la Figure 5.25 ont été obtenus sur le maillage M_2, qui comprend un nombre total de points $N_2 \times N_2$. Les valeurs de η_R obtenues sur les autres maillages M_0, M_1 et M_3 sont de 0.988, 0.993 et 0.998, respectivement. Comme prévu, la conservation globale de la masse est améliorée à

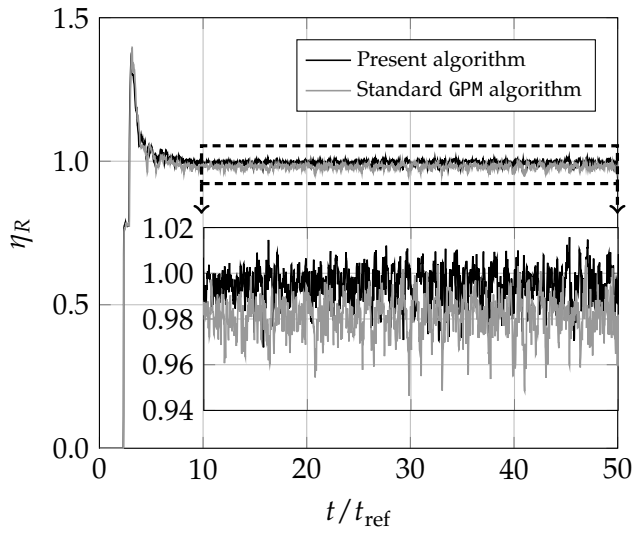


Figure 5.25. *Évolution de η_R en fonction du temps pour l'algorithme IBM actuel et la méthode GPM standard. Le temps est adimensionnée par le temps nécessaire à une particule fluide pour traverser le domaine de calcul de l'entrée à la sortie*

mesure que le maillage est affiné.

Enfin, il est également remarquable que le surcoût de calcul reste assez faible. En effet, on le trouve inférieur à 0,3%. Par exemple, pour le maillage M_2, le temps supplémentaire requis par itération est inférieur à $80 \cdot 10^{-6}$ s.

5.2.3 Interaction d'un obstacle avec une onde de choc issue d'une explosion à l'air libre

Le problème de la réflexion, de la diffraction et de l'interaction d'ondes de choc sur un obstacle est d'une grande importance pratique. Nous rencontrons en effet ce problème dans un grand nombre de situations industrielles, par exemple, l'interaction de chocs issus des différentes composantes d'un lanceur ou encore l'interaction de chocs induits par le fuselage et les surfaces portantes d'un véhicule de rentrée. D'autre part, la conception d'un système propulsif constitue un problème technologique majeur dans la définition des futurs engins hypersoniques. A ce sujet, l'entrée d'air, servant à ralentir l'écoulement pénétrant dans la chambre de combustion supersonique au travers d'une série d'ondes de choc, joue un rôle crucial. Il faut en effet que l'écoulement arrive dans cette dernière avec une efficacité maximale et donc une perte minimale de la pression d'arrêt de l'écoulement. Les interactions successives de chocs qui se produisent dans le diffuseur de l'entrée d'air sont un facteur déterminant pour l'état de l'écoulement à l'entrée la chambre de combustion.

5.2.3.1 Diffraction d'une onde de choc sur un obstacle

Ce problème a fait l'objet de plusieurs études expérimentales et numériques [33, 66, 289, 42, 237]. La configuration de ce problème consiste à déplacer une onde de choc, initialement positionnée en amont de l'obstacle, vers ce dernier. La topologie d'écoulement est

généralement la même quelle que soit la géométrie de l'obstacle. Cette interaction génère des phénomènes complexes comme des ondes réfléchies, des tourbillons et un système varié de Mach, comme le montre la Figure 5.26. De manière synthétique, une réflexion régulière apparaît dans un premier temps. Lorsque l'onde de choc se propage, l'angle d'incidence augmente jusqu'à un angle critique à partir duquel la réflexion régulière est transformée en réflexion de Mach. L'interaction entre l'onde réfléchie et l'onde incidente donne naissance à un point triple $TP1$. La trajectoire de $TP1$ est appelé "système de point triple supérieur". Dans un deuxième temps lorsque l'onde de choc continue à se propager derrière le triangle, une deuxième onde de Mach apparaît hors du premier "système de point triple supérieur" et l'apparition d'un deuxième point triple $TP2$.

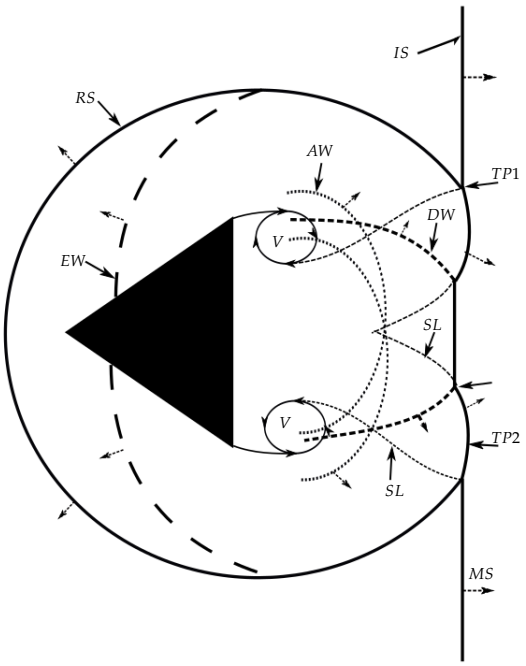
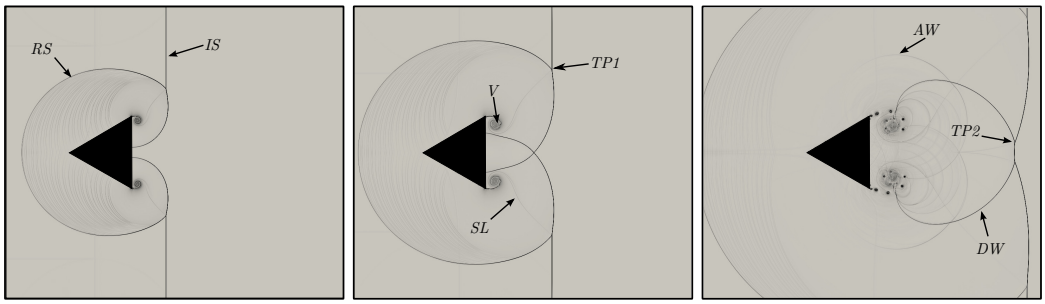


Figure 5.26. *Description des différents phénomènes générés par la diffraction d'une onde de choc plane sur une double rampe.RS : Onde réfléchie, IS : Onde incidente, TP1 : premier point triple, TP2 : deuxième point triple, MS : Onde de Mach, SL : ligne de glissement, V : Tourbillon, AW : Onde accélérée, DW : Onde décélérée, EW : Onde en expansion.*

Double rampe : nous considérons l'interaction d'une onde de choc à $M_s = 1.30$ avec un obstacle ayant la forme d'une double rampe. Ce cas test est un problème classique portant dans la littérature le nom de Schardin (1957) [237]. En aval de l'onde de choc (à droite), l'écoulement est initialisé à $(\rho_0, u_{1,0}, u_{2,0}, P_0) = (1, 0, 0, P_{\text{atm}})$ et l'état amont est calculé à partir des relations de Rankine-Hugoniot avec le nombre de Mach $M_s = 1.3$. On s'inspire des travaux de Chang et Chang [42] où l'on peut trouver le détail des paramètres géométriques de la simulation. Des conditions limites de type Neumann sont appliquées sur toutes les frontières de domaine. Le domaine de calcul contient $N_{x_1} \times N_{x_2} = 2500 \times 1500$ points. La surface de l'obstacle est modélisée par 1800 points Lagrangiens de telle sorte que chaque maille Eulérienne contienne au moins un point Lagrangien.

La Figure 5.27 permet de visualiser l'évolution de la structure d'écoulement à travers une série de *Schlieren* de masse volumique (défini par l'équation (5.34)). La structure des ondes de choc est similaire à celle décrite dans la Figure 5.26. Une comparaison à l'instant $t = 138\mu$s (

$t = 0$ correspond à l'instant ou la collision entre l'onde de choc et l'obstacle se produit) entre le *Schlieren* numérique et expérimental est représentée sur la Figure 5.28. On observe que le processus de génération de vortex et celui d'interaction choc-vortex est bien restitué par la simulation numérique, ce qui signifie que la présente méthode d'IBM arrive à reproduire l'essentiel du phénomène d'interaction onde de choc / obstacle.



(a) (b) (c)

Figure 5.27. *Description de la dynamique d'interaction choc/tourbillon à trois instants successifs.*

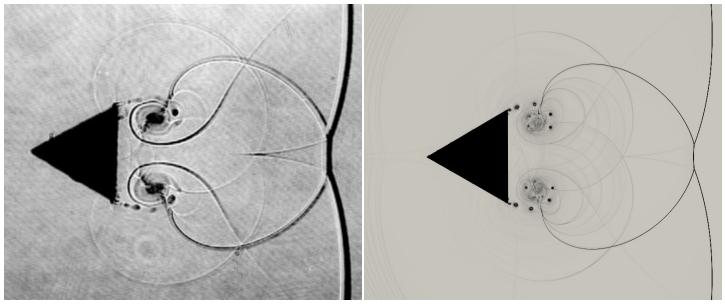


Figure 5.28. *Comparaison entre le Schlieren expérimentale (à droite) et numérique (à gauche) à l'instant $t = 138\mu s$.*

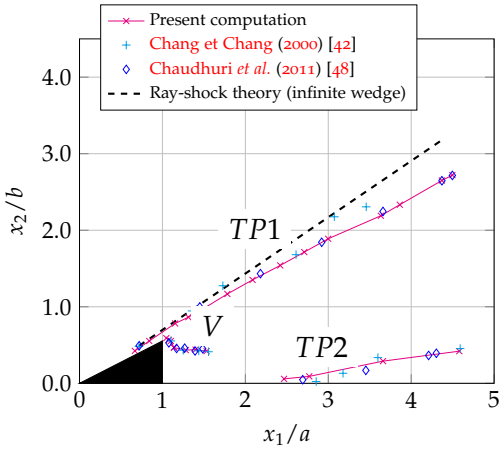


Figure 5.29. *Trajectoire des deux points triples et du centre du tourbillon pour le problème de Schardin (1957) [237].*

Sur la Figure 5.29, nous reportons l'évolution des trajectoires obtenu par l'actuelle simulation des deux points triples $TP1$ et $TP2$, ainsi que celui du centre du tourbillon. Ces trajectoires sont comparés à ceux obtenus expérimentalement par Chang et Chang [42] et numériquement par Chaudhuri *et al.* [48]. Les deux axes sont adimensionnés par a et b qui désigne respectivement la hauteur de la double rampe tracée à partir du sommet sur l'axe,

et la demi longueur de la double rampe. Nous constatons que les résultats obtenus par la présente méthode d'IBM sont en bon accord avec les références de la littérature, ce qui prouve ainsi la capacité de la méthodologie développée pour simuler l'effet de l'obstacle par l'intermédiaire d'une frontière immergée à reproduire les effets complexes d'interaction choc normal-obstacle.

Cylindre : nous avons ensuite appliqué la méthode frontière immergée pour le problème bien documenté de la simulation d'interaction d'une onde de choc à $M_s = 2.81$ et une un cylindre de rayon $r = 0.2$ cm [234, 22]. Le domaine de calcul est similaire à celui du problème de double rampe.

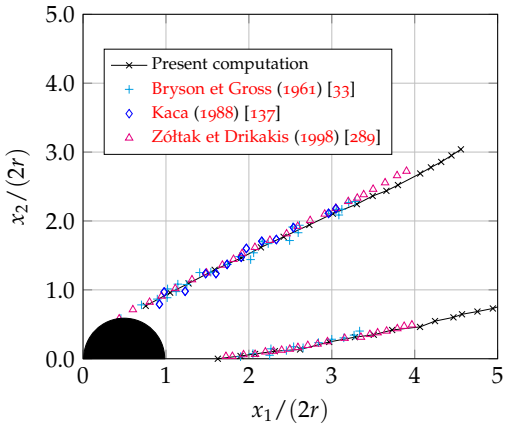
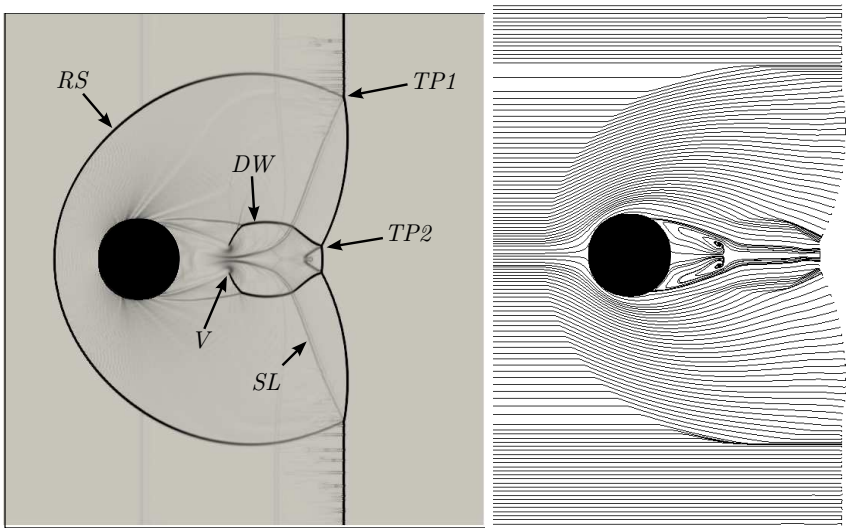


Figure 5.30. *Trajectoire des deux points triples pour le problème d'interaction choc plane et cylindre.*

Le calcul des trajectoires des deux points triples supérieur et inférieur est reporté sur la Figure 5.30. Les résultats de simulations sont comparés aux résultats numériques de Zółtak et Drikakis [289] et expérimentaux de Bryson et Gross [33] et de Kaca [137]. La comparaison montre que la présente méthode prédit avec satisfaction l'évolution du trajectoire des points triples. Une illustration de l'écoulement est donnée sur la Figure 5.31 sur laquelle est fourni un *Schlieren* de masse volumique et les lignes de courant obtenus $t = 30\mu$s à partir de l'instant de collision entre l'onde de choc et le cylindre. Les ondes de détente sont bien visibles au passage du cylindre dans la région d'accélération de l'écoulement. Dans le sillage, un écoulement complexe se forme avec des structures tourbillonnaires détachées et deux tourbillons contre-rotatifs prennent naissance. La Figure 5.32 trace le suivi l'évolution temporelle de la valeur de pression sur quatre position sur le cylindre en comparaison avec les données expérimentales de Kaca [137]. L'accord est globalement très bon.

5.2.3.2 Réflexion des ondes de choc (interférences RR-MR)

Nous considérons le dispositif présenté dans la Figure 5.33 qui a été récemment conçu par Kobayashi et Adachi [145] pour étudier le phénomène d'hystérésis lors de la transition réflexion de Mach (RM)-réflexion régulière (RR). Ce dispositif consiste à étudier l'interaction d'un choc incident à $M_s = 1.35$ et une double rampe tronquée "blunt wedge" avec une angle d'incidence $\theta_\omega = 47.3$. La topologie de l'écoulement dans le sillage de la double rampe



(a) (b)

Figure 5.31. *(a) Schlieren de masse volumique et (b) lignes de courant à $t = 30\mu s$.*

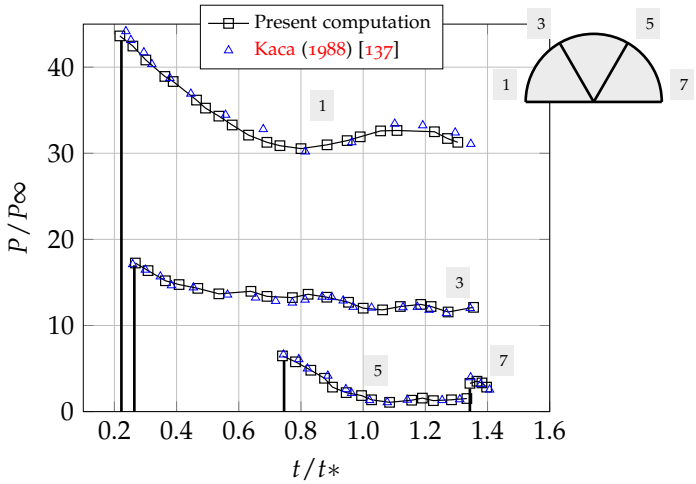


Figure 5.32. *Évolution temporelle de la valeur de pression au niveau de quatre positions sur le cylindre.*

tronquée est présentée dans Figure 5.35. Les différentes structures de naissance de tourbillons, d'interaction choc/tourbillons et de réflection d'onde de choc sont bien observées.

En présence de la rampe de compression, la réflexion de Mach met en jeu trois ondes de choc : une onde de choc incidente, une onde de choc réfléchie et un disque de Mach localement normal à la direction initiale de l'écoulement. Ces trois ondes de choc se rejoignent au point, appelé point triple, suivent une ligne rectiligne et se propagent vers l'aval. L'évolution spatiale de l'angle entre l'onde incidente et réfléchie ω_{ir} (cf. Figure 5.35) est reportée sur la Figure 5.34. La comparaison avec les données expérimentales de Kobayashi et Adachi [145] est satisfaisante, en particulier lorsqu'on tient compte de l'importante disparité qui existe dans les données expérimentales

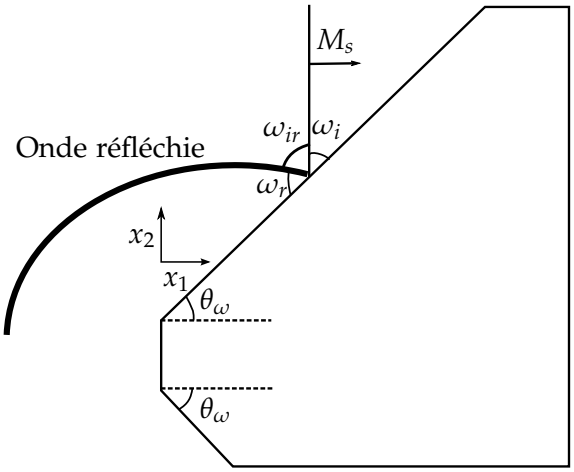


Figure 5.33. *Description de l'obstacle sous forme d'un coin tronqué. ω_{ir} représente l'angle entre l'onde incidente et réfléchie, ω_i l'angle de l'onde incidente et ω_r l'ongle réfléchi.*

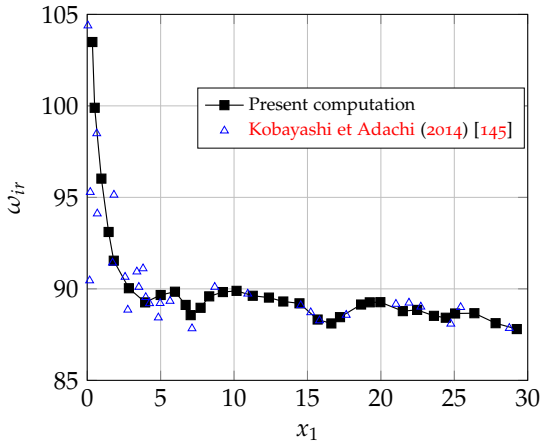
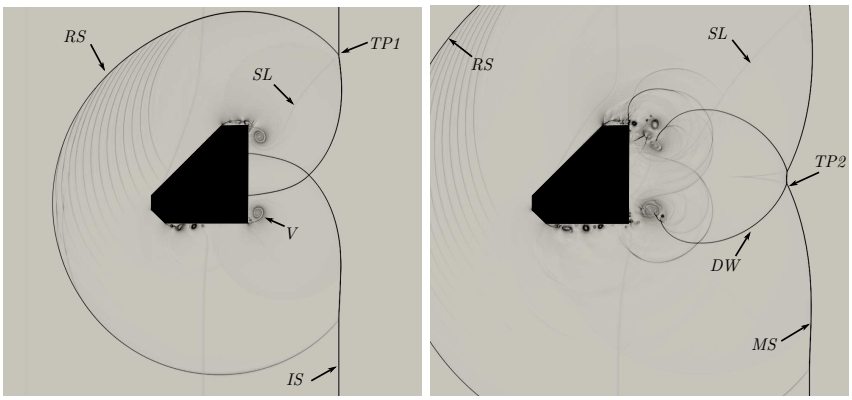


Figure 5.34. *Variation de l'angle ω_{ir} en comparaison avec les données expérimentales de Kobayashi et Adachi [145].*



(a) (b)

Figure 5.35. *Description de l'interaction choc-tourbillon avec un Schlieren pour le cas de la double rampe tronquée à deux instants successifs.*

5.2.4 Marche montante

Nous validons à présent la méthode d'IBM sur l'écoulement au voisinage d'une marche montante. Cette configuration fût introduite initialement par Emery (1968) [74] et reprise plus tard par Woodward et Colella (1984) [277]. Elle a fait l'objet d'un grand nombre de recherches et a servi pour la validation de plusieurs développements numériques et théoriques [102, 124] du fait de la complexité de la structure de l'écoulement qui se développe au passage et en aval de la marche. Le domaine de calcul est un rectangle de taille $L_{x_1} \times L_{x_2} = 3 \times 1(\text{cm})$ discrétisé avec $N_{x_1} \times N_{x_2} = 480 \times 160$ points, où le bord d'attaque de la marche montante d'une hauteur $0.2(\text{cm})$ est situé à $x_1 = 0.6(\text{cm})$. Le champ d'écoulement initial est défini avec une pression $P = 1.0$ atm et une vitesse horizontale U_∞ à l'entrée de Mach égal à 3. Des conditions de paroi glissante sont appliquées sur la frontière supérieure. Au niveau du plan de sortie, une condition de bord sortante est employée.

La topologie d'écoulement évolue en fonction d'un temps caractéristique adimenssionné défini par $t* = tU_\infty / L_{x_1}$. Dans un premier temps, à cause de la marche montante, une onde de choc détachée se forme et se réfléchie sur la paroi haute à $t* \approx 1$. L'onde de choc réfléchie est réfléchit à nouveau sur la paroi basse à $t* \approx 1.5$. Ensuite, un point triple se crée au niveau de la paroi haute et se déplace progressivement vers l'amont. La structure finale de l'écoulement est obtenue à $t* \approx 5$ et présente un choc fort dont la courbure est sensiblement diminuée. Nous choisissons d'arrêter notre simulation à $t* = 4$, instant où les structures (chocs, détentes, discontinuités de contact) sont particulièrement visibles.

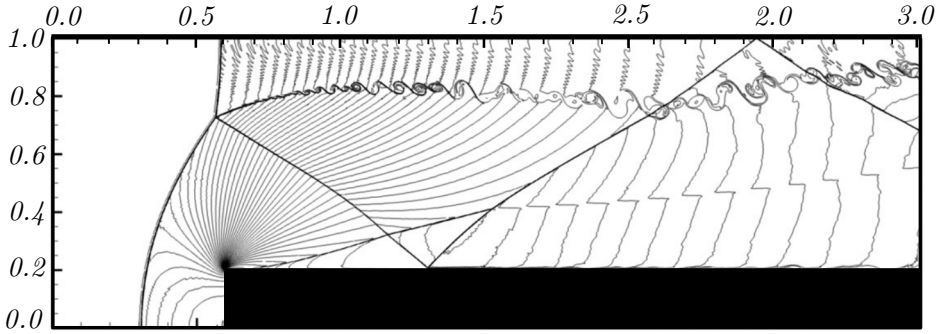


Figure 5.36. *Champ d'iso-contours de masse volumique ρ (30 niveaux réparties entre les extrema de ρ à $t* = 4$).*

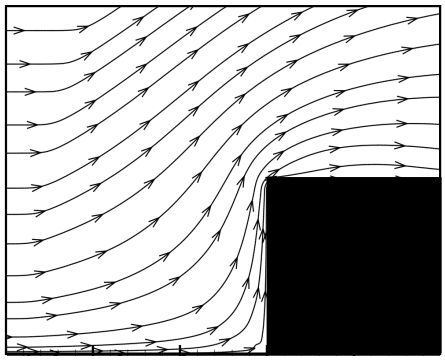


Figure 5.37. *Zoom sur lignes de courant autour du coin à $t* = 4$.*

La Figure 5.36 montre un *Schlieren* de masse volumique à $t* = 4$. Les tendances observées par Woodward et Colella [277] sont globalement bien reproduites par la présente simulation. En effet, on peut voir clairement plusieurs zones lisses séparées par les ondes de choc. On distingue également les instabilités de Kelvin-Helmholtz qui se développent le long de la couche de cisaillement supérieure. Ces instabilités sont maintenues lorsqu'elles se déplacent sur les ondes de choc. En outre, on trouve que le point triple se situe légèrement en avance par rapport à l'interface de la marche, alors qu'il doit être sur le même plan, comme l'a signalé Clain *et al.* [52]. Ceci peut s'expliquer par le critère d'activation non linéaire du WENO7 qu'il faut encore ajuster. Les lignes de courant au voisinage du coin de la Figure 5.37 nécessite un traitement particulier détaillé en annexe §D.

5.2.5 Écoulement subsonique autour d'une sphère

Nous simulons dans cette section un écoulement subsonique autour d'une sphère à faible nombre de Reynolds. La sphère de diamètre D est placée à $x_c = (0,0,0)$ et le domaine de calcul utilisé pour cette configuration est $[-4D,12D] \times [-4D,4D] \times [-4D,4D]$. Un maillage uniforme de $\Delta x_1 = \Delta x_2 = \Delta x_3 = 0.04D$ est utilisé autour de la sphère ; le maillage est étiré loin de la sphère. Cette dernière est définie à l'aide de 840 points Lagrangiens espacés sur sa surface. Le nombre de Mach à l'entrée est fixé à 0.1 et le nombre de Reynolds basé sur le diamètre de la sphère est égale à 100. Des conditions d'extrapolation sont appliquées dans les deux conditions x_2 et x_3, alors qu'une condition de type NSCBC est appliquée au plan de sortie. L'écoulement autour de la sphère est stationnaire et symétrique comme le montre les lignes de courant sur un zoom autour de la sphère présenté sur la Figure 5.38. La Figure 5.39 montre la distribution du coefficient de pression C_p sur la surface de la sphère. La comparaison entre notre simulation celle réalisée par Fadlun *et al.* [80] et Fornberg [85] est très favorable.

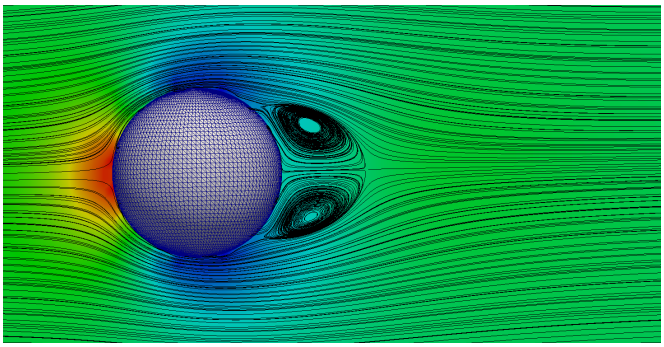


Figure 5.38. *Champ de pression et lignes de courant pour l'écoulement subsonique autour de la sphère.*

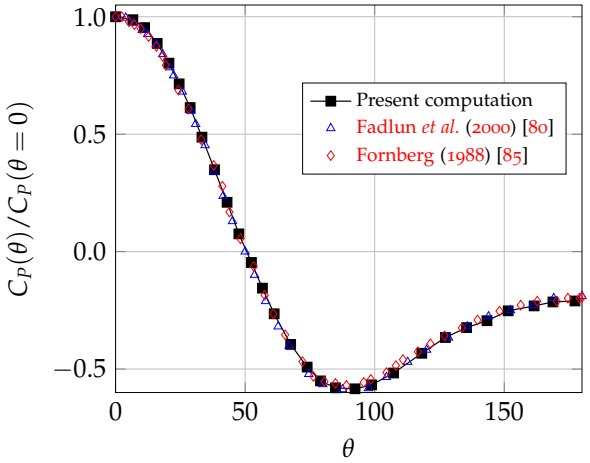
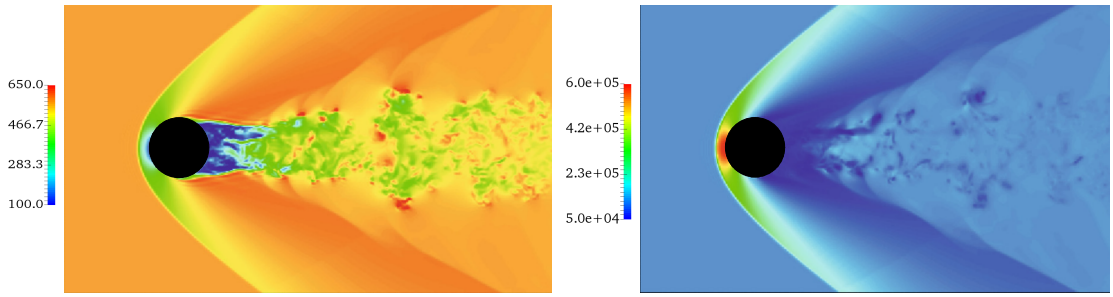


Figure 5.39. *Distribution de $C_p(\theta)$ en fonction de θ normalisé par $C_P(\theta = 0)$ sur la sphère pour $Re = 100$.*

5.2.6 Écoulement supersonique autour d'une sphère

Cette configuration concerne un écoulement supersonique de Mach $M_\infty = 2$ autour d'une sphère. Là encore, la surface de cette dernière est discrétisée par le biais du format STL. Le centre du sphère est situé à $\boldsymbol{x_0} = (0,0,0)$. Celle-ci est de diamètre $D = 10$cm. Le domaine de calcul est $[-2D,8D] \times [-3D,3D] \times [-3D,3D]$ et comporte $512 \times 256^2 \approx 33M$ points. Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse d'entrée U_∞ et le diamètre de la sphère est

$Re_D \approx 6.5 \times 10^5$. Des conditions d'extrapolations sont appliquées suivant toutes les directions à l'exception du plan d'entrée. L'onde de choc détachée formée en amont de la sphère placée dans l'écoulement supersonique, ainsi que les structures tourbillonnaires dans le sillage, sont bien restitués, comme le montre la coupe dans le plan $x_1 - x_2$ présentée sur la Figure 5.40. Le coefficient de portance C_D et la distance du choc détaché par rapport à la sphère Δ sont comparés aux résultats obtenus par Bailey et Hiatt [10] et Al-Marouf et Samtaney [2]. Les données correspondantes sont reportées sur le Tableau 5.8. Les résultats de la littérature sont bien comparables aux nôtres.



(a) u (b) P

Figure 5.40. *Champ de u et P pour l'écoulement supersonique autour de la sphère.*

	C_D	Δ
Résultats de simulation	0.98	1.82
Bailey et Hiatt [10]	1.07	1.80
Al-Marouf et Samtaney [2]	0.96	1.83

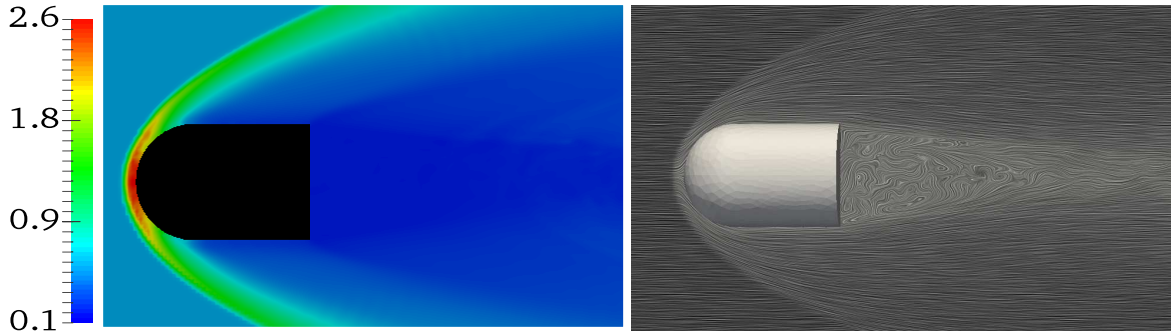
***Tableau 5.8** – Valeurs du coefficients de portance C_D et de la distance de séparation Δ dans le cas d'écoulement supersonique autour de la sphère à $Re_D = 6.5 \times 10^5$.*

5.2.7 Écoulement supersonique autour d'un projectile

Cette dernière illustration sur un cas applicatif se propose d'effectuer un calcul préliminaire d'un écoulement supersonique à $M = 4.48$ autour d'un projectile sphérique de rayon $R =$ 7.5cm. Elle s'inspire des expériences de Lehr [158]. Le volume de calcul est un parallélépipède de taille $L_{x_1} \times L_{x_2} \times L_{x_3} = 15R \times 10R \times 10R$ discrétisé en $N_{x_1} \times N_{x_2} \times N_{x_3} = 400 \times 200 \times 200$ points et la valeur retenue pour le CFL est égale à 0.5. Les équations d'écoulements sont résolues pour un mélange multi-espèces inerte à $P_\infty = 42.63$ KPa et $T_\infty = 293$ K. Les conditions limites appliquées sont les mêmes que celles utilisées pour le cas de la sphère supersonique. Une condition de paroi adiabatique non glissante est appliquée sur le projectile modélisé, quant à lui, par la présente méthode d'IBM en le discrétisant par 2600 point Lagrangiens.

Une visualisation de l'écoulement après que le choc oblique en amont se soit établi et stabilisé est tracée sur la Figure 5.41. Cette figure présente un choc en arc suivi d'une importante activité tourbillonnaire provenant de la surface du projectile, la séparation de

l'écoulement ainsi que la naissance d'une zone de recirculation bien établie sont également bien identifiées en aval du projectile .



(a) (b)

Figure 5.41. *Ecoulement supersonique autour du projectile. (a) Champ de masse volumique et (b) Trajectoire du flux et une visualisation de la discrétisation triangulaire du projectile.*

Récapitulatif

Nous avons présenté dans ce chapitre une stratégie permettant d'étendre la simulation d'un écoulement de fluide compressible aux géométries complexes. La méthode des frontières immergées permet de maintenir les bénéfices d'un maillage Cartésien. Son principe repose sur l'introduction d'un terme de forçage local aux équations de Navier-Stokes simulant l'effet des parois. La méthode implémentée au sein du solveur CREAMS consiste en un couplage de deux variantes, une, faisant intervenir un terme de forçage continu agissant sur les équations de quantité de mouvement, et l'autre, se basant sur le principe de miroir entre les points fantômes et points images et permettant de corriger l'équation d'énergie, de généraliser les conditions aux limites scalaires et d'améliorer la conservation de la masse et des espèces. Les développements effectués afin de mettre en place une telle stratégie ont été décrits. Dans un premier temps, un format STL de représentation surfacique de tout objet régulier par une série de triangles a été présenté. Ensuite, la description du solveur CREAMS a permis de montrer comment, à partir d'un maillage volumique et de la description surfacique de l'objet immergé, il est possible d'identifier les points de maillage et de les catégoriser en points solide, fluide, fantôme, image et d'interpolation. Dans un second temps, nous avons évalué les aptitudes de la nouvelle méthode de frontières immergées à restituer les effets des parois sur plusieurs configurations académiques 2D et 3D. La méthode a été validée également sur des simulations réactives dans le cas d'un écoulement de affleurant une cavité. Cette dernière étude fait l'objet d'une thèse en cours.

6

Initialisation et paramètres de la simulation DNS

Mini-sommaire

6.1 Turbulence homogène isotrope **94**
6.1.1 Échelles spatiales et temporelles de la turbulence 95
6.1.2 Facteurs d'aplatissement et de dissymétrie 97
6.2 État de l'art des travaux antérieurs **97**
6.3 Génération des conditions initiales de turbulence **99**
6.3.1 Première Approche 100
6.3.2 Deuxième Approche 101
6.3.3 Choix du spectre initial de turbulence 103
6.3.4 Comparaison de différentes conditions initiales 104
6.4 Aspects numériques de la simulation directe **108**
6.4.1 Conditions initiales 108
6.4.2 Condition en entrée 109
6.4.3 Condition de sortie 112
6.4.4 Paramètres de la simulation 113

L'omniprésence de la turbulence dans un grand spectre de phénomènes physiques et d'applications industrielles rend son étude et l'investigation de ses différents aspects d'une importance capitale. La turbulence peut se révéler soit favorable, soit défavorable, selon les applications. En effet, parmi les effets ambivalents majeurs de la turbulence, on peut noter [46, 268] :

- la turbulence favorise le processus de mélange d'une phase dispersée. Par contre, elle peut également provoquer la coalescence de gouttelettes dans des écoulement diphasiques ;
- la turbulence réduit les homogénéités cinématiques, thermiques, massiques au sein de l'écoulement, tout en augmentant les transferts pariétaux ;
- la turbulence augmente la traînée (frottement visqueux), mais peut diminuer sensiblement la traînée de forme, en retardant le décollement des écoulements.

Dans le cadre de cette thèse, on s'intéresse à l'évolution du transport aéronautique et aérospatial à grande vitesse qui dépend fortement du premier effet de la turbulence. À très grande vitesse de vol (supersonique ou hypersonique), le temps disponible pour l'injection du combustible, la création du mélange réactif comburant-carburant, et la combustion est très court. Dans ce contexte, le processus de combustion et la stabilisation des flammes est principalement dicté par la nature turbulente de l'écoulement. De plus, l'aérodynamique des technologies opérationnelles mises en en place est confrontée inévitablement à des situations où des ondes de chocs sont engendrées dans différentes parties de l'aéronef comme les entrées d'air, les tuyères de détente des étages propulsifs des lanceurs spatiaux et au niveau des ailes. Ces ondes peuvent impacter sensiblement les couches limites qui se développent sur ces parties. De surcroît, en interagissant avec une onde de choc, l'état de la turbulence change drastiquement. Fujimori *et al.* [88] ont étudié la possibilité de profiter de ces ondes de chocs afin d'intensifier la turbulence à grande échelle et participer ainsi au mélanges des réactifs. L'ensemble des mécanismes physiques caractéristiques du phénomène d'interaction entre une turbulence et une onde de choc, revêt une importance particulière.

La configuration "canonique" qui a attiré une attention particulière de la part de la communauté étudiant l'interaction choc-turbulence, est celle d'une turbulence isotrope "traversant" une onde de choc nominalement plane. Ce problème idéalisé permet d'étudier de façon isolée la mécanique de l'interaction mutuelle entre la turbulence et l'onde de choc. Ceci permet de s'affranchir des différentes complications qui résultent de l'étude de l'interaction choc-couche limite, à savoir, l'instabilité basse fréquence des couches limites et les effets de paroi qui l'accompagnent [68, 69].

Ce chapitre est dédié à présenter brièvement la turbulence homogène isotrope et ses échelles caractéristiques. Nous détaillerons par la suite la configuration de simulation utilisée pour l'étude du phénomène d'interaction onde de choc plane-THI.

6.1 Turbulence homogène isotrope

Avant d'étudier la dynamique de l'interaction choc-turbulence, il est nécessaire d'introduire différentes quantités statistiques classiquement utilisées lors de l'étude de la turbulence homogène isotrope. Un champ de turbulence est dit isotrope si les propriétés statistiques de la turbulence sont invariantes par rotation des axes et par réflexion sur les plans de coordonnées. Quant au caractère homogène, il traduit l'invariance dans l'espace de toute moyenne statistique de quantité fluctuante (invariance par translation). Il en découle que tout champ isotrope est nécessairement homogène puisque toute translation peut se réduire au produit de deux rotations [47]. Dans un écoulement THI, le mouvement du fluide n'est pas nécessairement entretenu et l'énergie issue des grandes échelles est intégralement transmise aux plus petites échelles où elle est dissipée.

Dans ce qui suit, l'opérateur $\overline{\bullet}$ indique l'opérateur de moyenne au sens de Reynolds (ou

moyenne statistique tout simplement) tandis que ce même opérateur avec l'indice additionnel f, *i.e.* $\widetilde{\bullet}$, désigne la moyenne au sens de Favre $\widetilde{\bullet} = \overline{\rho\bullet}/\overline{\rho}$. Les symboles primes, $\bullet'$, et secondes, $\bullet''$, désignent leurs fluctuations respectives.

6.1.1 Échelles spatiales et temporelles de la turbulence

La quantité statistique la plus fondamentale, le tenseur des corrélations spatiales des vitesses en deux points, s'écrit :

$$\mathcal{R}_{\alpha,u_iu_j}(r,t) = \frac{\overline{u_i(\boldsymbol{x},t)u_j(\boldsymbol{x}+r\boldsymbol{e}_\alpha,t)}}{\overline{u_i^2(\boldsymbol{x},t)}} \tag{6.1}$$

où r est la distance entre les deux points considérés. La connaissance de $\mathcal{R}_{\alpha,u_iu_j}$ permet de calculer les échelles de longueur intégrales $\mathcal{L}_{ij,\alpha}$ qui représentent une longueur moyenne de corrélation spatiale du champ de vitesse fluide suivant la direction α :

$$\mathcal{L}_{ij,\alpha} = \int_0^\infty \mathcal{R}_{\alpha,u_iu_j}(r,t)dr. \tag{6.2}$$

Puisque l'isotropie impose $\langle u_iu_j\rangle = 0$ pour $i \neq j$, on peut en déduire directement que $\mathcal{L}_{ij,\alpha} = 0$ pour $i \neq j$. Cette même hypothèse implique également la relation :

$$\mathcal{L}_{11,1} = \mathcal{L}_{22,2} = \mathcal{L}_{33,3}. \tag{6.3}$$

Les échelles de longueur intégrales longitudinale $\mathcal{L}_f$ et transversale $\mathcal{L}_g$ sont respectivement :

$$\mathcal{L}_f = \frac{1}{3}\mathcal{L}_{ii,i} = \frac{1}{3}\int_0^\infty \mathcal{R}_{i,u_iu_i}(r,t)dr,\ \mathcal{L}_g = \frac{1}{6}\sum_j^{j\neq i}\mathcal{L}_{ii,j} = \frac{1}{6}\sum_j^{j\neq i}\int_0^\infty \mathcal{R}_{j,u_iu_i}(r,t)dr. \tag{6.4}$$

Dans un écoulement THI, la relation de De Karman et Howarth [59] permet de relier ce deux échelles de longueur :

$$\mathcal{L}_f = 2\mathcal{L}_g. \tag{6.5}$$

Définissons maintenant une vitesse turbulente caractéristique u_t :

$$u_t = \sqrt{\frac{2}{3}\mathcal{K}}, \tag{6.6}$$

où $\mathcal{K}$ désigne l'énergie cinétique turbulente. L'échelle temporelle intégrale τ, plus communément appelée temps de retournement des tourbillons, est alors estimée par :

$$\tau = \frac{\mathcal{L}_f}{u_t}. \tag{6.7}$$

Dans le cas où la connaissance des corrélations spatiales est délicate, on peut également estimer une macro-échelle (échelle intégrale) $\mathcal{L}_t$ en posant :

$$\mathcal{L}_t = \frac{\mathcal{K}^{3/2}}{\varepsilon}, \tag{6.8}$$

et une échelle temporelle correspondante τ :

$$\tau = \frac{\mathcal{K}}{\varepsilon}. \tag{6.9}$$

Toutes les grandeurs précédemment définies caractérisent les plus grandes structures tourbillonnaires de l'écoulement. Les plus petites structures de l'écoulement, les structures dissipatives, sont quant à elles caractérisées par les échelles de Kolmogorov η_K (échelle spatiale) et τ_K (échelle temporelle) :

$$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}, \ \tau_K = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2}. \tag{6.10}$$

Enfin, nous pouvons également introduire la micro-échelle de Taylor λ [1] que l'on qualifie parfois d'échelle de dissipation car reliée au taux de dissipation turbulente en THI :

$$\lambda = \sqrt{\frac{15\nu u_t^2}{\varepsilon}}. \tag{6.11}$$

À partir des ces échelles caractéristiques, il est possible de former différents nombre de Reynolds turbulents :

- Re_t basé sur une échelle de longueur intégrale, qui caractérise le taux de turbulence $Re_{\mathcal{L}} = u_t \mathcal{L}_t / \nu$;
- Re_λ basé sur la micro-échelle de Taylor, qui quantifie la séparation des échelles entre les grosses structures porteuses d'énergie et les petites structures dissipatives $Re_\lambda = u_t \lambda / \nu$.

Le Tableau 6.1 récapitule les différentes définitions relatives aux échelles dynamiques temporelles et spatiales.

	Échelle intégrale	Échelle Taylor	Échelle Kolmogorov
Espace	$\mathcal{L}_t = \frac{\mathcal{K}^{3/2}}{\varepsilon}$	$\lambda = \sqrt{\frac{10\mathcal{K}\nu}{\varepsilon}}$	$\eta_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4}$
Temps	$\tau = \frac{\mathcal{K}}{\varepsilon}$	$\tau_\lambda = \sqrt{\frac{15\nu}{\varepsilon}}$	$\tau_K = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}$
Nombre de Reynolds	$Re_{\mathcal{L}} = \frac{\mathcal{K}^2}{\nu\varepsilon}$	$Re_\lambda = \sqrt{\frac{20}{3\nu\varepsilon}}\mathcal{K}$	$Re_K = 1$

***Tableau 6.1** – Récapitulatif des échelles dynamiques spatiales et temporelles.*

1. Il s'agit de l'échelle de Taylor transverse qui peut être également notée λ_g. De même, on peut définir l'échelle de Taylor longitudinale λ_f donnée par $\lambda_f = \sqrt{2}\lambda_g$

6.1.2 Facteurs d'aplatissement et de dissymétrie

Pour évaluer à quel moment un état représentatif est atteint, nous utilisons l'évolution temporelle du facteur de dissymétrie et d'aplatissement associé aux gradients de fluctuations de vitesse et qui quantifie l'écart à la situation gaussienne des gradient de fluctuations de vitesses. Ils sont définis par :

$$\mathcal{S} = \frac{1}{3}\mathrm{Tr}\left(\mathcal{S}_{ij}\right), \quad \text{avec} \quad \mathcal{S}_{ij} = \frac{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^3}}{\left(\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^2}\right)^{3/2}}, \tag{6.12}$$

$$\mathcal{T} = \frac{1}{3}\mathrm{Tr}\left(\mathcal{T}_{ij}\right), \quad \text{avec} \quad \mathcal{T}_{ij} == \frac{\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^4}}{\left(\overline{\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)^2}\right)^2}, \tag{6.13}$$

D'après Orszag et Patterson Jr [201] et Tavoularis *et al.* [252], pour une turbulence isotrope développée, la valeur de la grandeur S doit vérifier $-0.60 \leq \mathcal{S} \leq -0.35$.

Quant au facteur d'aplatissement, divers études, comme celle menée par Mills Jr *et al.* [188], affirment que, pour caractériser une turbulence développée et homogène, il faut satisfaire la condition $3.30 \leq \mathcal{T} \leq 4.00$.

6.2 État de l'art des travaux antérieurs

Une partie de cette section est principalement basée sur l'article de synthèse de Andreopoulos *et al.* (2000) [3]. Les études les plus marquantes concernant la configuration "canonique" d'interaction choc-turbulence peuvent être classées en quatre catégories.

- Les premières se sont principalement basées sur une approche théorique, utilisant pour la plupart des analyses linéaires basées sur la décomposition modale de la turbulence introduite initialement par Kovasznay (1953) [147]. La théorie de l'analyse d'interaction linéaire (mentionnée ci-après : LIA pour *Linear Interaction Theory*, voir annexe §E pour une description introductive à cette approche) a été développée par Moore (1953) [192] et Ribner (1954) [225] pour analyser l'interaction des ondes acoustiques et de vorticité respectivement avec une onde de choc normal instable. Les travaux précurseurs de Moore (1953) [192] et Ribner (1954) [225] ont suscité l'intéret de nombreux chercheurs pour étudier les problèmes de chocs et de turbulence libre (par exemple, Mahesh *et al.* (1996) [175], Fabre *et al.* (2001) [79], Wouchuk *et al.* (2009) [279]). Mahesh *et al.* [175] ont repris les travaux de Moore [192] en généralisant le problème 2D d'interaction entre un choc et un champ mixte contenant simultanément des perturbations de rotationnel et d'entropie. La théorie LIA s'est imposée comme un bon moyen de comparaison avec

les résultats issus de simulation numérique directe. Dans l'ensemble, la théorie LIA a offert un bon accord avec plusieurs analyses de Mahesh *et al.* (1996) [175]. Récemment, Ryu et Livescu (2014) [231] ont même montré que, sous certaines conditions portant sur le Mach turbulent et les longueurs caractéristiques de turbulence et de choc, les solutions DNS convergent vers les solutions LIA.
Une autre approche découlant de la théorie LIA a été également utilisée pour l'étude d'interaction choc-turbulence. Il s'agit de la théorie de la Distortion Rapide (mentionnée ci-après : RDT pour *Rapid Distrotion Theory*). Son principe est de réduire le problème en question aux termes "rapides" des équations de Navier-Stokes. Physiquement, elle est interprétée comme l'analyse sur un temps "court" de la réponse du choc au champ turbulent incident. Le choc initialement plan est assimilé à une compression monodimensionnelle homogène ne tenant pas compte de la compression du champ turbulent par le champ moyen. Il en découle que la déformation du front de l'onde de choc qui se produit en réponse aux fluctuations turbulentes lors de l'interaction ne peut être restituée convenablement par cette approche. Néanmoins, l'approche RDT peut être utilisée comme un modèle très simplifiée et rapide de l'interaction choc-turbulence.

- La deuxième catégorie d'étude basée sur l'approche expérimentale s'est développée au début des années 1980 et a donné lieu à une grande variété d'études. Certains chercheurs se sont mis à étudier expérimentalement les mécanismes sous-jacents responsables de l'amplification de l'énergie cinétique turbulente et la modification des échelles de longueur à travers le choc (la turbulence étant générée dans ces études par des grilles) (par exemple, Agui *et al.* (2005) [1], Barre *et al.* (1996) [12], Auvity *et al.* (2002) [8]). L'objectif de ces études expérimentales était motivé par la nécessité de comprendre l'amélioration du mélange à travers l'interaction onde de choc et l'interaction onde de choc-couche limite turbulente.
- L'approche numérique du problème n'a vu le jour qu'au début des années 1990 avec Rotman (1991) [228] qui a résolu les équations d'Euler pour calculer l'effet du passage d'un choc en mouvement sur un champ turbulent bidimensionnel. Il a réussi à observer une augmentation de l'énergie cinétique et une diminution des échelles de longueur turbulentes. À la suite de ce travail, au moins trois équipes se sont penchées sur l'étude de ce problème en résolvant les équations tridimensionnelles de Navier-Stokes, compressibles et instationnaires : le département de mécanique de l'université de Stanford (on cite ici les travaux de Lee *et al.* [155], Lee *et al.* [156], Lee *et al.* [157], Kevlahan *et al.* [143], ..., et plus récemment Larsson et Lele [153] et Larsson *et al.* [152].), l'équipe allemande avec les travaux de Hannappel et Friedrich [113] et l'équipe française de l'ENSICA avec les travaux de Jamme *et al.* (2002) [126] et Jamme *et al.* (1999) [128]. Les différentes simulations effectuées ont confirmé certains résultats obtenus par la voie expérimentale. Elles ont permis de mieux comprendre l'amplification de l'énergie cinétique turbulente et de l'enstrophie, la réduction des échelles de longueur et l'amélioration de l'anisotropie dans les tenseurs de Reynolds en aval du choc. Toutefois, certaines contradictions sont aussi apparues. La plus flagrante concerne l'évolution des échelles de longueur caractéristiques de la turbulence : si DNS

et LIA concluent généralement à une diminution de ces échelles, leur augmentation a par contre été observée dans de nombreuses études expérimentales.

- La quatrième approche s'inscrit dans l'effort de modélisation du phénomène d'interaction en vue de proposer des modèles simples à utiliser pour des simulations RANS. Sinha *et al.* (2003) [242] ont proposé un modèle de turbulence de type $k - \varepsilon$ adapté au problème d'interaction choc-THI. L'adaptation du modèle s'est porté sur la considération de l'effet instationnaire de l'onde du choc qui tend, selon les auteurs, à restreindre l'amplification de la turbulence en aval de la discontinuité. Veera et Sinha (2009) [266] ont affiné ce modèle à travers la restitution de l'influence de du terme de diffusion de l'enthalpie fluctuante par la turbulence. Très récemment, Vemula et Sinha (2017) [267] ont conduit une comparaison entre plusieurs modèles de turbulence vis-à-vis leur capacité à restituer l'influence de la corrélation pression-dilatation et ont proposé une amélioration du modèle aux tensions de Reynolds RSM (*Reynolds Stress Models*).

6.3 Génération des conditions initiales de turbulence

On se concentre dans cette section sur l'initialisation d'un champ turbulent en vue de simuler l'évolution spatio-temporelle d'un écoulement compressible homogène et isotrope. L'objectif est de décrire une méthode de génération des conditions initiales vérifiant l'hypothèse d'homogénéité et d'isotropie convenable pour des écoulements de fluide compressible.

Pour une turbulence incompressible, la seule variable dynamique qui doit être spécifiée initialement est la vitesse puisque la pression est déterminée par la condition d'une divergence nulle de la vitesse. En plus, il n'y a pas d'échelle dans le cas incompressible autre que celle de la turbulence. De ce fait, pour générer le champ initial de fluctuations de vitesse, un spectre d'énergie est imposé fournissant ainsi le niveau d'énergie cinétique turbulente de tous les modes dans l'espace spectral. Ensuite, les phases sont déterminées aléatoirement pour générer un écoulement homogène. Compte tenu que le champ de vitesse pour le cas incompressible a une divergence nulle, nous nous assurons que le champ ainsi généré est à divergence nulle. Cette méthode a été initialement proposée par Rogallo [227] et a été utilisée de manière extensive par plusieurs auteurs pour initier des champs incompressibles [280, 210].

Par contre, l'initialisation d'une turbulence pour un écoulement de fluide compressible est plus délicate. En effet, comme la pression ne s'adapte pas localement aux fluctuations de vitesse, d'autres variables dynamiques sont à spécifier. Il est nécessaire ainsi d'introduire les fluctuations de ρ, $\boldsymbol{u}$ et T. Samtaney *et al.* [235] ont étudié la dépendance des résultats d'une simulation DNS d'une THI à la façon dont la turbulence est générée initialement. Dans ce qui suit, nous allons décrire deux procédures numériques de génération du champ turbulent qui vont nous servir ultérieurement comme conditions limites en entrée du domaine du calcul d'interaction choc-turbulence.

6.3.1 Première Approche

La première méthode d'initialisation décrite ici est celle proposée par Erlebacher *et al.* (1990) [75]. Elle est similaire à celle introduite par Passot et Pouquet [204]. Le principe de cette méthode est de générer un écoulement aléatoire dans le domaine physique pour la densité, la vitesse et la température (ρ, $\boldsymbol{u}$ et T). Nous illustrons la méthode pour le champs fluctuant de la vitesse. Nous commençons tout d'abord par effectuer un tirage aléatoire de triplets choisis dans $[-1/2, 1/2]^3$. Par application d'une transformation de Fourier spatiale tridimensionnelle, nous obtenons un champ de nombres complexes dont le module et la phase sont aléatoires. Le vecteur vitesse est ensuite décomposé en deux composantes. La première est à divergence nulle (la partie solénoïdale $\boldsymbol{u}^S$), la deuxième est à rotationnel nul (partie compressible $\boldsymbol{u}^C$) :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^S + \boldsymbol{u}^C, \tag{6.14}$$

avec :

$$\boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{u}^S = 0, \quad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{u}^C = 0. \tag{6.15}$$

D'après le théorème de Helmholtz, cette dernière décomposition est unique. Dans le domaine spectral, la décomposition (6.14) est effectuée selon l'expression :

$$\widehat{\boldsymbol{u}^S}(\boldsymbol{k}) = \widehat{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{k}) - \frac{\boldsymbol{k}.\widehat{\boldsymbol{u}^S}(\boldsymbol{k})}{k^2}\boldsymbol{k}, \tag{6.16}$$

où $\boldsymbol{k} = (k_1, k_2, k_3)$ le vecteur du nombre d'onde de norme $k = \|\boldsymbol{k}\|$ et $\widehat{\vartheta}$ la transformée de Fourier d'une quantité ϑ. Rogallo [227] exprime les composantes spectrales en fonction des phases α_1, α_2 et α_3, choisies aléatoirement dans l'intervalle $[0, 2\pi]$, comme suit :

$$\widehat{u_1}(\boldsymbol{k}) = \frac{\Xi\, kk_2 + \Upsilon k_1 k_3}{k\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad \widehat{u_2}(\boldsymbol{k}) = \frac{-\Xi\, kk_1 + \Upsilon k_2 k_3}{k\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad \widehat{u_3}(\boldsymbol{k}) = -\frac{\Upsilon\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}{k}, \tag{6.17}$$

avec :

$$\Xi = \sqrt{\frac{E(\boldsymbol{k})\Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3}{2\pi k^2}} e^{i\alpha_1}\cos(\alpha_3), \quad \Upsilon = \sqrt{\frac{E(\boldsymbol{k})\Delta k_1 \Delta k_2 \Delta k_3}{2\pi k^2}} e^{i\alpha_2}\sin(\alpha_3), \tag{6.18}$$

et $E(\boldsymbol{k})$ le spectre d'énergie cinétique totale à imposer sur les composantes du champ de vitesse afin de les normaliser. Pour contrôler le poids relatif de $\widehat{\boldsymbol{u}^S}$ et $\widehat{\boldsymbol{u}^C}$, ou encore quantifier la part de compressibilité de l'écoulement, nous introduisons le paramètre χ définit comme étant le rapport entre l'énergie cinétique compressible et l'énergie totale :

$$\chi = \frac{\iiint \widehat{\boldsymbol{u}^S}\widehat{\boldsymbol{u}^{*S}} d^3\boldsymbol{x}}{\iiint \widehat{\boldsymbol{u}^S}\widehat{\boldsymbol{u}^{*S}} d^3\boldsymbol{x} + \iiint \widehat{\boldsymbol{u}^C}\widehat{\boldsymbol{u}^{*C}} d^3\boldsymbol{x}} = \frac{\iiint E^C(\boldsymbol{k}) d^3\boldsymbol{k}}{\iiint E(\boldsymbol{k}) d^3\boldsymbol{k}}. \tag{6.19}$$

Ainsi, dans le domaine spectral, on réajuste la procédure précédente pour générer les trois composantes de vitesse de $\widehat{\boldsymbol{u}^S}$ et $\widehat{\boldsymbol{u}^C}$ en imposant les spectres suivants :

$$E^C(\boldsymbol{k}) = (1-\chi)E(k), \quad E^S(\boldsymbol{k}) = \chi E(k), \tag{6.20}$$

ce qui donne pour la partie solénoïdale de vitesse, en remplaçant $E(\boldsymbol{k})$ dans (6.17), l'expression de Ξ et Υ de (6.18) par $E^C(\boldsymbol{k})$. La procédure de génération des fluctuations des quantités scalaires est plus simple. Pour les fluctuations de la masse volumique et de température, les coefficients de Fourier dans le domaine spectral sont donnés par :

$$\widehat{\rho'} = \sqrt{\frac{E^\rho(\boldsymbol{k})}{4\pi k^2}} e^{i\alpha_4}, \quad \widehat{T'} = \sqrt{\frac{E^T(\boldsymbol{k})}{4\pi k^2}} e^{i\alpha_5}, \tag{6.21}$$

avec E^ρ et E^T le spectre d'énergie de masse volumique et de température à imposer et α_4 et α_5 deux nombres tirés aléatoirement dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Afin de simplifier le choix du spectre initial, on fait la simplification suivante :

$$E^\rho(\boldsymbol{k}) \sim E^T(\boldsymbol{k}) \sim E(\boldsymbol{k}) \tag{6.22}$$

À ce niveau, le signal de la turbulence est généré dans l'espace spectral 3D. Le nombre de nœuds dans chaque direction doit être au moins égal à $N_i/2$ pour permettre une description minimale de toutes les structures décrites par le spectre d'énergie. Les transformées de Fourier inverses sont utilisées pour obtenir le signal dans l'espace physique. L'algorithme ainsi obtenu est présenté dans l'algorithme 2. Cette méthode d'initialisation permet d'atteindre plus rapidement un état de turbulence "réaliste" après une phase transitoire qui permet aux différents champs de s'adapter aux équations de Navier-Stokes. Elle permet aussi une contrôlabilité des différents paramètres des fluctuations initiales et le poids de compressibilité initiale.

Algorithm 2 Procédure de FFT inverse

1: `Calcul des valeurs de l'espace spectral dans le demi espace` $k_1 \geq 0$
2: `Transformée de Fourier inverse dans le demi domaine` $k_1 \geq 0$ `selon la direction` k_3 `(valeurs complexes)`
3: `Transformée de Fourier inverse dans le demi domaine` $k_1 \geq 0$ `selon la direction` k_2 `(valeurs complexes)`
4: `Initialisation du demi domaine` $k_1 < 0$ `tel que` $\widehat{\boldsymbol{u}}(k_1) = \widehat{\boldsymbol{u}}^*(-k_1)$`. Ensuite, une transformée de Fourier inverse est réalisée selon la direction` k_1`.`

6.3.2 Deuxième Approche

Ristorcelli et Blaisdell [226] utilisent une approche statistique basée sur la perturbation des équations non visqueuses et isentropiques. Un développement asymptotique des équations de Navier-Stokes avec l'hypothèse de faible nombre de Mach turbulent permet de lier la dilatation fluctuante aux champs de vitesse et de pression. A l'aide de l'hypothèse de quasi-normalité de la vitesse, la variance de la dilatation peut être évaluée ensuite. Une décomposition générique

des différents champs permet alors d'écrire :

$$\begin{cases} \boldsymbol{u} &= \boldsymbol{u}^S + \boldsymbol{u}^C \\ P &= P_\infty + P + P^S \\ \rho &= \rho_\infty + \rho' \end{cases} \tag{6.23}$$

où (ρ_∞, p_∞) est l'état de référence thermodynamique de densité et de pression. Si nous négligeons dans le système de Navier-Stokes (2.1a)-(2.1c), le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et le flux de chaleur surfacique q_i, et si nous réécrivons l'équation d'énergie (2.1c) en fonction de P, nous obtenons le système sous forme vectorielle et non-conservative :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \rho + \rho \boldsymbol{\nabla} \cdot u &= 0, \\ \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + u \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u} + \frac{\boldsymbol{\nabla} P}{\rho} &= 0, \\ \frac{\partial P}{\partial t} + u \cdot \boldsymbol{\nabla} P + P \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} &= 0, \end{cases} \tag{6.24}$$

En ne considérant que les termes du premier ordre du système d'équations de fluctuations de pression et en supposant un écoulement faiblement compressible ($M_t^2 \ll 1$) à grand nombre de Reynolds, Ristorcelli et Blaisdell [226] obtiennent à partir du système (6.24), le système simplifié suivant :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}^S = 0, & (6.25a) \\ \boldsymbol{\nabla}^2 P^S + \rho_\infty \dfrac{\partial^2 u_i^S u_j^S}{\partial x_i \partial x_j} = 0, & (6.25b) \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{u}^S}{\partial t} + \boldsymbol{u}^S \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^S + \dfrac{1}{\rho_\infty} \boldsymbol{\nabla} P^S = 0. & (6.25c) \end{cases}$$

La méthode de Ristorcelli et Blaisdell [226] néglige les échelles de temps acoustiques rapides et suppose pour la consistance l'hypothèse $\mathrm{P}^C / P^S = \mathcal{O}\left(M_t^2\right)$. En négligeant la partie irrotationnelle du champ de vitesse et les fluctuations de pression devant la pression moyenne, l'équation (6.25c) donne une équation pour la divergence :

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}^C = -\frac{1}{P_\infty} \left(\frac{\partial P^S}{\partial t} + \boldsymbol{u}^S \cdot \boldsymbol{\nabla} P^S \right), \tag{6.26}$$

qui s'écrit dans le domaine spectral comme

$$\widehat{\boldsymbol{d}} = -\frac{1}{P_\infty} \left(\frac{\partial \widehat{P^S}}{\partial t} + i k_i \widehat{u_i^S P^S} \right) \tag{6.27}$$

où nous avons également négligé les variations temporelles de pression moyenne. Notons ici que, selon l'équation (6.26), les fluctuations de la pression solénoïdale sont liées aux fluctuations de la composante de vitesse solénoïdale. Par le biais de la loi d'état, elles produisent aussi celles de la densité et de la température. L'algorithme de génération d'une THI compressible suivant la méthode de Ristorcelli et Blaisdell [226] est présenté dans l'algorithme 3.

Algorithm 3 Procédure de génération de THI selon Ristorcelli et Blaisdell [226]

1: Générer un champ de fluctuations purement solénoïdal suivant la méthode de Rogallo [227].

2: Les fluctuations de pression, nécessaires pour déterminer la dilatation, s'obtiennent à l'aide de l'équation de Poisson (6.25b). L'équation de Poisson peut être résolue dans l'espace spectral en écrivant:

$$\widehat{P^S} = -\rho_\infty \frac{k_i k_j}{k^2} \widehat{u_i^S u_j^S}, \tag{6.28}$$

Quant à sa dérivée, nous l'obtenons à partir de (6.25c) en utilisant la résultante dans (6.25b). Ceci conduit à une équation pour P^S :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{P^S}}{\partial t} &= -\rho_\infty \frac{k_i k_j}{k^2} \frac{\partial \widehat{u_i^S u_j^S}}{\partial t} \\ &= -\rho_\infty \frac{k_i k_j}{k^2} \widehat{u_j^S \left(u_k^S \frac{\partial u_i^S}{\partial u_k} + \frac{\partial P^S}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 u_i^S}{\partial x_k \partial x_k} \right)} \end{aligned} \tag{6.29}$$

3: En résolvant (6.30), la dilatation est obtenue à partir de l'équation (6.27). Pour une turbulence homogène, la vitesse dilatationnelle peut être trouvée à partir de la dilatation en travaillant dans l'espace de Fourier. Comme $\boldsymbol{u}^C$ est irrotationnelle, ses coefficient de Fourrier sont alignés avec les nombres d'onde $\boldsymbol{k}$ et peut être déterminée grâce à la relation :

$$\widehat{u_j^C} = -i \frac{k_j}{k^2} \widehat{d} \tag{6.30}$$

Ainsi, le champ compressible initial de vitesse peut s'obtenir via la relation :

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}^S - i \frac{k_j}{k^2} \widehat{\boldsymbol{d}} \tag{6.31}$$

4: En considérant une évolution isentropique, nous relions les fluctuations de masse volumique aux fluctuations de pression par :

$$\rho' = \rho_\infty \left(1 + \frac{P^S}{P_\infty} \right)^{1/\gamma} \approx \rho_\infty \left(1 + \frac{P^S}{\gamma P_\infty} \right) \tag{6.32}$$

6.3.3 Choix du spectre initial de turbulence

Le spectre d'énergie $E(k)$ peut être principalement caractérisé par deux nombres d'onde :

- k_e lié aux échelles les plus énergétiques ($l_e = 2\pi/k_e$), dépendant des conditions de production de la turbulence,
- k_d lié aux échelles dissipatives ($l_d = 2\pi/k_d$), fonction de la viscosité du fluide et du taux de dissipation.

Entre ces deux nombres d'onde se situe la zone inertielle où s'effectue le transfert d'énergie des grandes vers les petites échelles de la turbulence. Le rapport k_d/k_e permet de caractériser la dynamique de l'écoulement dans le sens où il détermine l'étendue de cette zone inertielle. Plus k_d/k_e est grand, plus la zone inertielle est importante. Notons également que l_e fournit

une bonne estimation des échelles intégrales alors que l_d est environ d'un ordre de grandeur supérieur à η_K, l'échelle de longueur de Kolmogorov. Le spectre de turbulence est disponible pour initialiser le champ fluide, nous avons choisi par souci de simplicité le spectre de Passot-Pouquet ayant la forme suivante :

$$E(\boldsymbol{k}) = 16\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{u_0^2}{k_0}\left(\frac{k}{k_0}\right)^4 e^{-2\left(\frac{k}{k_0}\right)^2}, \tag{6.33}$$

où u_0 représente l'écart type de la composante longitudinale de la vitesse fluctuante et k_0 le nombre d'onde le plus énergétique. La fonction $E(\boldsymbol{k})$ a une forme symétrique par rapport à k_0 et concentre l'essentiel de l'énergie sur les nombres d'onde voisins de k_0. Le spectre de dissipation $D(\boldsymbol{k})$ est sensiblement le même que le spectre d'énergie $E(k)$ initialement, ce qui signifie qu'il n'y a quasiment pas de zone inertielle. Les petites échelles sont donc peu présentes initialement et se développent dans les premiers temps du calcul.

6.3.4 Comparaison de différentes conditions initiales

Dans cette section, nous présentons quelques résultats validant le "bon" comportement de la turbulence fluide simulée. En particulier, nous nous attachons à étudier l'influence des conditions initiales dans le développement des phénomènes acoustiques, qui ne sont pas contrôlées et peuvent donner lieu à des conditions initiales erronées pour la simulation de la turbulence. Nous vérifions également le caractère isotrope (et donc homogène) de ces conditions initiales. Le développement temporel, ou plus précisément la décroissance temporelle de cette turbulence, est également discutée. Pour ce faire, nous avons implémenté et testé les deux approches présentées ci-dessus et nous avons fait le choix de présenter ici seulement les résultats obtenus à partir de la méthode de Ristorcelli et Blaisdell [226].

À partir d'un même champ de vitesse initial à divergence nulle $\boldsymbol{u}^S$, nous générons une turbulence homogène isotrope compressible, ensuite nous augmentons le degré de complexité des conditions initiales pour pouvoir enfin tester l'influence de chaque paramètre. Les simulations tridimensionnelles associées sont résumés dans le Tableau 6.2. La condition initiale $\mathtt{THI}_0$ ne prend en compte aucune fluctuation de pression ou de masse volumique. Il s'agit de l'initialisation d'un champ THI pour un champ incompressible tel qu'introduite par Rogallo [227]. La condition $\mathtt{THI}_1$ suppose un écoulement incompressible où les fluctuations de pression sont données par l'équation de Poisson (6.28). Cette initialisation fut utilisée initialement pour générer un champ compressible par Feiereisen *et al.* (1981) [83]. Enfin la troisième condition initiale $\mathtt{THI}_2$ suppose un comportement isentropique ; les fluctuations de pression et de masse volumique sont prises en compte et le champ de vitesse est corrigé avec une partie à rotation nulle. Dans les simulation où les fluctuations de pression sont considérées, seule la partie de pression solénoïdale est prise en compte.

La contribution de vitesse à divergence nulle est initialisée selon le spectre de Passot-Pouquet (6.33). Avec ce spectre, les grandeurs caractérisant la turbulence initiale et la taille L

du domaine de simulation sont les suivantes :

$$\begin{cases} \frac{L}{\mathcal{L}_t} & = & \frac{k_0 L}{\sqrt{2\pi}} & = & 10.02 \\ Re_\lambda & = & \frac{\rho_\infty \lambda u_0'}{\mu} & = & 25.0 \\ M_t & = & \frac{u_0'}{a} & = & 0.23 \end{cases} \tag{6.34}$$

Pour les trois simulations, nous imposons $k_{\max}\eta = 1.5$ et une résolution de 256^3. Le fluide considéré est de l'air (N_2 et O_2) ayant $\rho_\infty \approx 1.3$ à $T_\infty = 295$K.

Simulation	P	ρ'	$\boldsymbol{u}$
$\mathtt{THI}_0$	0	0	$\boldsymbol{u}^S$
$\mathtt{THI}_1$	$\widehat{P^S} = -\rho_\infty \frac{k_i k_j}{k^2} \widehat{u_i^S u_j^S}$	0	$\boldsymbol{u}^S$
$\mathtt{THI}_2$	$\widehat{P^S} = -\rho_\infty \frac{k_i k_j}{k^2} \widehat{u_i^S u_j^S}$	$\rho_\infty \left(1 + \frac{p^S}{\gamma P_\infty}\right)$	$\boldsymbol{u}^S + \boldsymbol{u}^C$

Tableau 6.2 *– Génération des conditions initiales*

Les conditions initiales testées donnent des résultats similaires pour l'évolution de l'énergie cinétique (Figure 6.1(a)) et du Mach turbulent (Figure 6.1(b)). Seule la condition $\mathtt{THI}_0$ exhibe des résultats légèrement différents dans les premiers instants. Ainsi, à partir d'un temps $t \approx 0.3\tau$, l'énergie cinétique turbulente $\mathcal{K}$ et le Mach turbulent M_t décroissent de la même façon pour les trois simulations. L'enstrophie, définie comme étant le carré de la vorticité $\Omega = \widetilde{\omega^2}/2$, subit une légère augmentation jusqu'à $t \approx 0.8\tau$, puis diminue de façon monotone pour les trois simulations. Pour rappel, La distribution spatiale d'une quantité quelconque ϑ au sens de Reynolds peut être caractérisée par sa valeur moyenne :

$$\overline{\vartheta}(t) = \frac{\int_0^{L_{x_1}} \int_0^{L_{x_2}} \int_0^{L_{x_3}} \varphi(x_1, x_2, x_3, t) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \mathrm{d}x_3}{\int_0^{L_{x_1}} \int_0^{L_{x_2}} \int_0^{L_{x_3}} \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \mathrm{d}x_3}, \tag{6.35}$$

et la valeur moyenne au sens de Favre s'écrit :

$$\widetilde{\vartheta}(t) = \frac{\int_0^{L_{x_1}} \int_0^{L_{x_2}} \int_0^{L_{x_3}} \rho\varphi(x_1, x_2, x_3, t) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \mathrm{d}x_3}{\int_0^{L_{x_1}} \int_0^{L_{x_2}} \int_0^{L_{x_3}} \rho(x_1, x_2, x_3, t) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \mathrm{d}x_3}. \tag{6.36}$$

Pour les fluctuations de la masse volumique (Figure 6.2(a)) et de la pression (Figure 6.2(b)), les résultats obtenus sont bien différents. Les fluctuations générées dans la simulations surestiment manifestement celles générées avec les autres conditions initiales. En plus, cette tendance se maintient sans atténuation au cours du temps. L'évolution temporelle des résultats de la simulation $\mathtt{THI}_2$, où les fluctuations de masse volumique sont initialement générés à l'aide de l'hypothèse isentropique, est monotone. Par contre, avec la simulation $\mathtt{THI}_1$, où seules les fluctuations de pression sont prises en compte, les fluctuations de masse volumique augmentent sur quelques temps de retournement avant de décroître. A priori, seuls les résultats obtenus par la simulation $\mathtt{THI}_2$ sont plus rapidement exploitables. L'évolution de divergence du champ de vitesse (cf. Figure 6.2(c)) donne des résultats plus marquant. La simulation $\mathtt{THI}_0$ surestime d'un ordre de grandeur les résultats issus des deux autres types d'initialisation. Ce type de conditions est donc à rejeter quand il s'agit d'initialiser des

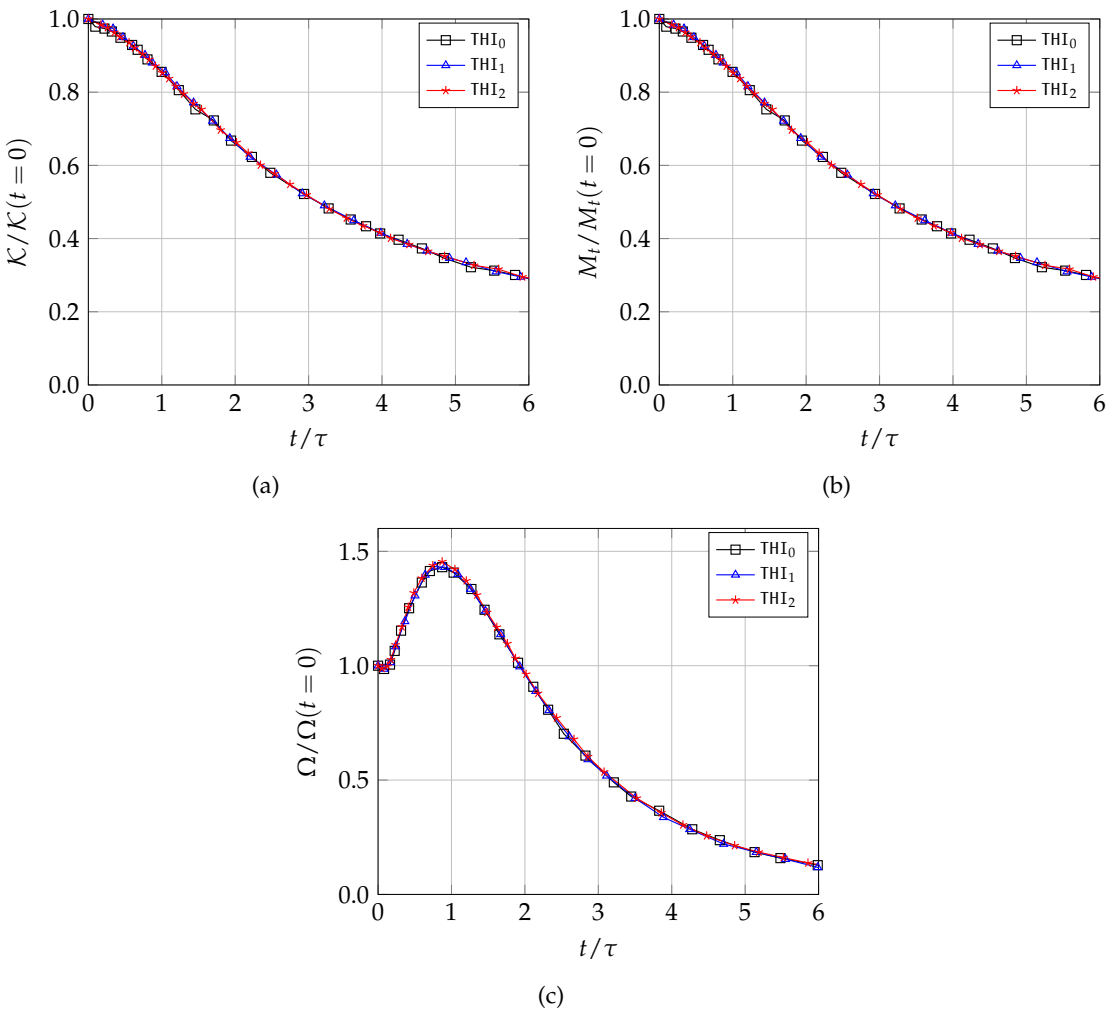


Figure 6.1. *Évolution temporelle de (a) l'énergie cinétique, (b) Mach turbulent et (c) enstrophie pour les différentes simulations.*

écoulements compressibles car il génère des ondes acoustiques et entropiques parasites. Les deux autres sont pratiquement semblables après quelques temps de retournements et semblent bien adaptées aux écoulements compressibles, bien que la condition $\mathtt{THI}_2$ montre une évolution quasi-monotone offrant une plus grande capacité à être exploitée plus rapidement possible sans grands effets transitoires. L'ajout des fluctuations de pression et de masse volumique limite la création de composante de vitesse à dilatation non nulle. L'évolution des facteurs de dissymétrie $\mathcal{S}$ et d'aplatissement $\mathcal{T}$ sont présentées sur les Figure 6.3(a) et Figure 6.3(b). Nous remarquons que ces grandeurs atteignent des valeurs stables ($\mathcal{S} \approx -0.45$ et $\mathcal{T} \approx 3.45$) et caractéristiques de la turbulence homogène dès que l'on dépasse le temps $t \approx 3\tau$. Nous pouvons définir ainsi un premier temps d'évolution que l'on qualifie de "transitoire" qui est le temps nécessaire à l'écoulement initial pour devenir solution des équations de Navier-Stokes et présenter des caractéristiques turbulentes cohérentes. Dans la suite, la condition $\mathtt{THI}_2$ sera retenue et les simulations ont été conduites sur 3τ.

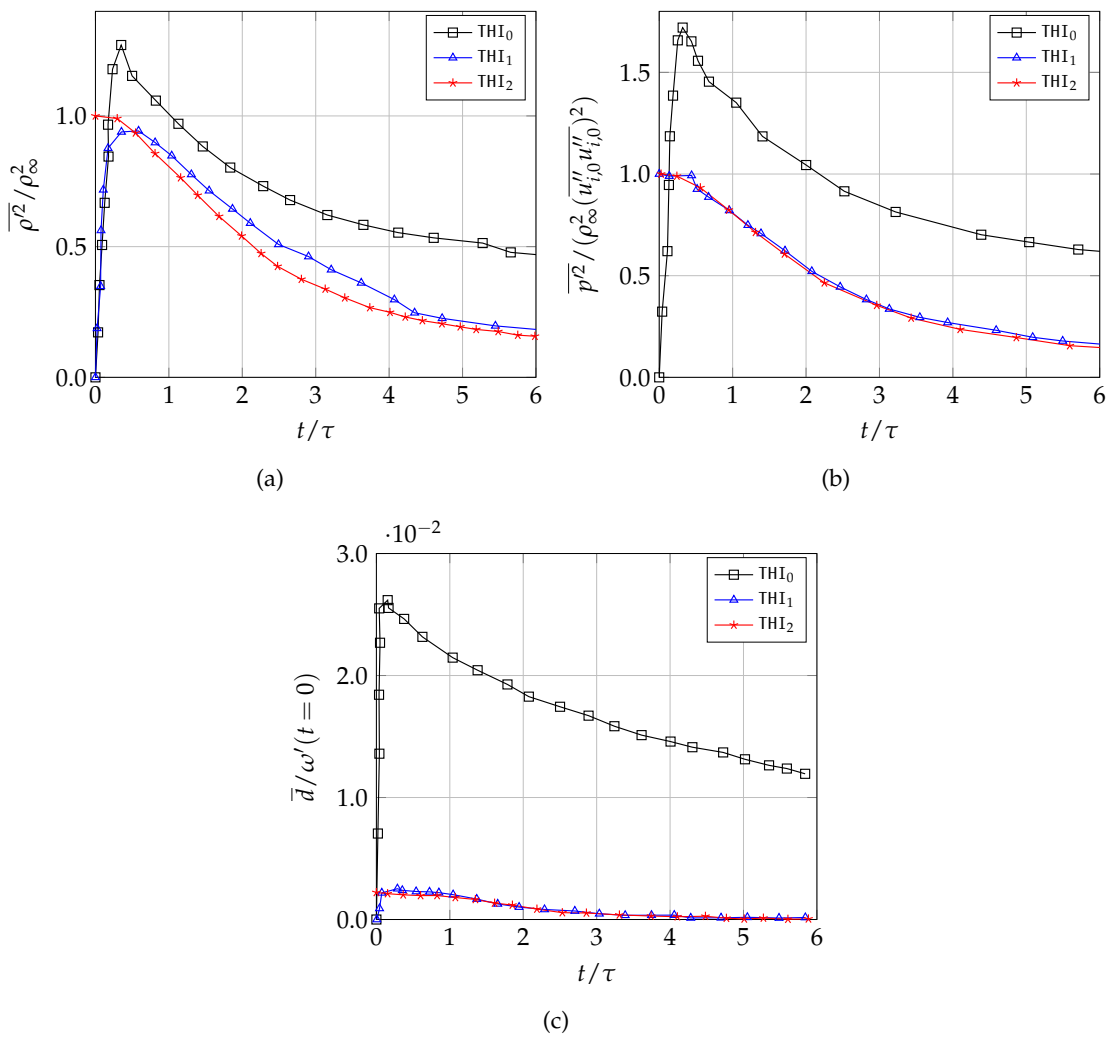


Figure 6.2. *Évolution temporelle de fluctuations de masse volumique (a), de pression (b) et de divergence (c) pour les différentes simulations.*

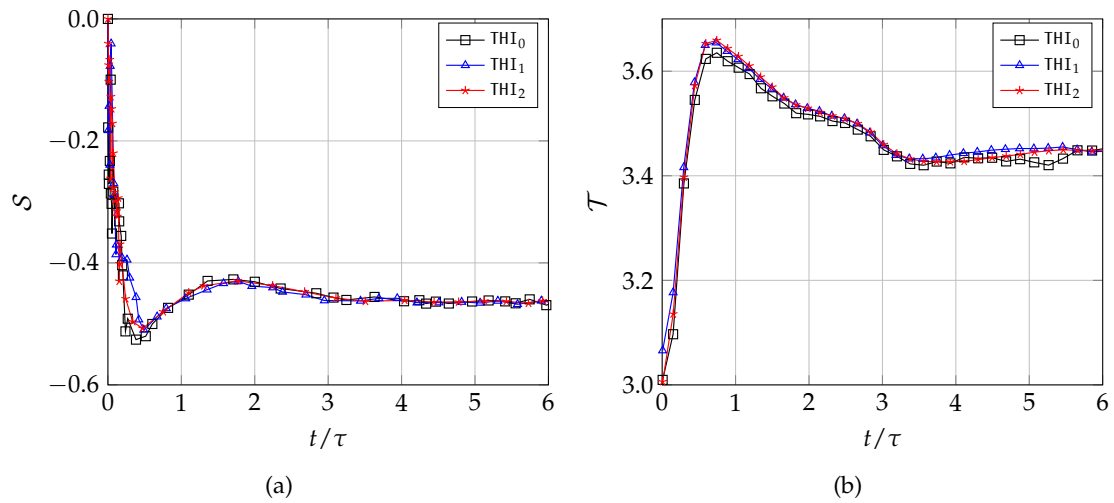


Figure 6.3. *Évolution temporelle du facteur de dissymétrie $\mathcal{S}$ (a) et d'aplatissement $\mathcal{T}$ (b) pour les différentes simulations.*

6.4 Aspects numériques de la simulation directe

Nous allons décrire dans cette section les méthodes numériques mises en œuvre pour la simulation directe d'interaction entre une turbulence homogène isotrope libre et un choc droit. Bien que la configuration numérique étudiée soit simple, elle nous a confrontés à de multiples problèmes d'ordre purement numérique que nous veillerons à mettre en évidence dans cette section.

La configuration de calcul utilisée est schématisée sur la Figure 6.4. Les simulations principales sont réalisées dans un domaine de taille $4\pi \times (2\pi)^2$ contenant à $x_1 = \pi$ un choc stationnaire. Dans les deux directions transversales x_2 et x_3, l'écoulement est homogène. Pour réaliser l'interaction de la turbulence avec l'onde de choc droite, des fluctuations turbulentes sont injectées dans la direction longitudinale x_1 au niveau de l'entrée supersonique. Ces fluctuations sont advectées par le mouvement moyen supersonique et uniforme pour interagir avec l'onde de choc et sont évacuées à l'aide de la condition non-réflective de sortie subsonique de type NSCBC en plus d'une zone éponge. Des conditions de périodicité sont appliquées dans les directions transversales x_2 et x_3. Les coefficients de transport sont déterminés à l'aide de la librairie EGLIB.

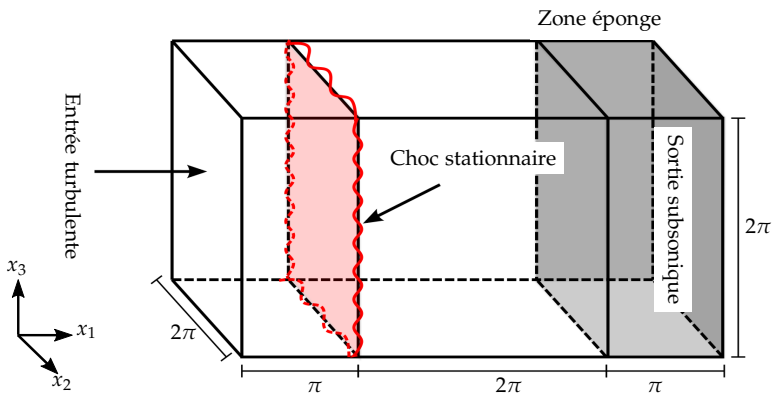


Figure 6.4. *Représentation schématique du domaine de calcul utilisé pour les simulations numériques d'interaction choc-turbulence.*

6.4.1 Conditions initiales

Pour les présentes simulations d'interaction choc-turbulence, l'initialisation consiste à imposer à $x_1 = \pi$ un choc droit laminaire et stationnaire. Ce choc est obtenu à partir des relations de Rankine-Hugoniot laminaires qui sont spécifiées comme point de départ d'un calcul préliminaire pour le choc seul. Les conditions aval (indicées '2' ou 'd') sont données en fonction des conditions amont (indicées '1' ou 'u') et du nombre de Mach M_1 choisi. Les conditions amont sont imposées sur le premier quart du domaine de calcul, tandis que les conditions aval sont spécifiées sur le reste du domaine. Le champ résultant ne satisfait pas les équations du problème car les relations de Rankine-Hugoniot ne tiennent pas compte de la viscosité du fluide. Cependant, à partir de cette initialisation, le calcul permet d'aboutir

rapidement à une solution stationnaire avec un choc d'épaisseur finie. Cette simulation préliminaire permet de gagner du temps dans l'établissement des phénomènes étudiés lors du calcul principal d'interaction.

6.4.2 Condition en entrée

Nous superposons à l'écoulement supersonique moyen $(\rho_\infty, U_\infty, 0, 0, P_\infty)$ correspondant au nombre de Mach incident à l'entrée des fluctuations $(\rho', u'_1, u'_2, u'_3, P')$ issues d'une première simulation de décroissance libre de turbulence homogène isotrope `DTHI` dont les grandeurs instantanées ont été stockées à l'instant t_{stockage}. On utilise ce champ pour alimenter la condition d'entrée de notre calcul. Les caractéristiques de chaque "cube" utilisé à l'entrée du domaine pour les trois simulations correspondant à trois valeurs du Mach à l'amont du choc sont regroupées dans le Tableau 6.3.

	A	B	C
Re_λ	26.0	26.0	26.0
M_t	0.211	0.211	0.211
$\mathcal{S}$	-0.46	-0.45	-0.46
$\mathcal{T}$	3.43	3.41	3.43
$u'_{1,rms}/U_\infty$	0.091	0.104	0.113
$\rho'_{1,rms}/\rho_\infty$	0.107	0.108	0.108
$p'_{1,rms}/P_\infty$	0.133	0.135	0.135
$\overline{u'_1 T'}/(u'_{1,rms} T'_{rms})$	-0.017	-0.019	-0.019

Tableau 6.3 *– Caractéristiques des données turbulentes utilisées pour alimenter les trois simulations de calcul d'interaction choc-turbulence. Valeurs correspondant au plan d'entrée du domaine principal de calcul.*

Pour alimenter le plan d'entrée pendant toute la durée du calcul d'interaction et éviter d'avoir des statistiques périodiques, nous avons testé trois méthodes de génération du champ turbulent d'injection.

1. La première consiste à générer N_r réalisations indépendantes de champs de fluctuations turbulentes de taille $[0, 2\pi]^3$, où N_r est un entier naturel, obtenus à partir d'une `DTHI` pour lesquelles nous stoppons la décroissance énergétique lorsqu'un état de turbulence développée similaire est atteint. Ces N_r champs turbulents "gelés" statistiquement stationnaires et possédant des caractéristiques déterminées sont superposés aux grandeurs moyennes à l'entrée et injectés grâce à l'hypothèse de Taylor. L'avantage de cette méthode est que le calcul d'une `DTHI` d'un cube de taille $[0, 2\pi]^3$ nécessite peu de mémoire et est facile à stocker.
2. L'inconvénient possible de la première méthode est le raccordement entre deux cubes successifs. La non-compatibilité entre deux champs successifs peut faire apparaître des modes acoustiques parasites au passage d'un champ à l'autre. Or, Lee *et al.* [155] ont montré que l'hypothèse de Taylor n'est valide que pour la partie hydrodynamique de l'écoulement, comme la vorticité et l'énergie cinétique, et non pour la partie acoustique.

Pour remédier à ce problème, Xiong *et al.* [281] proposent une méthode de concaténation 'blending' de deux réalisations. Considérons la concaténation de deux cubes indépendants issues d'une DTHI ayant les mêmes statistiques de taille $[0,2\pi]^3$ en une boite plus large dans la direction x_1 ayant ainsi la taille $[-2\pi,2\pi] \times [0,2\pi]^2$. Suivant Xiong *et al.* [281], les deux champs de vitesse $u_i^{(1)}$ et $u_i^{(2)}$ (ayant une moyenne nulle) issus des deux réalisations sont concaténés pour donner lieu au nouveau champ u_i suivant la formule :

$$u_i = u_i^{(1)} \cos(\alpha) + u_i^{(2)} \sin(\alpha) - \frac{\partial \varphi}{\partial x_i}, \quad \text{avec} \quad |x_1| \leq l_b, \tag{6.37}$$

où α est un angle variant continûment sur la région de concaténation ayant la taille l_b (cf. Figure 6.5).

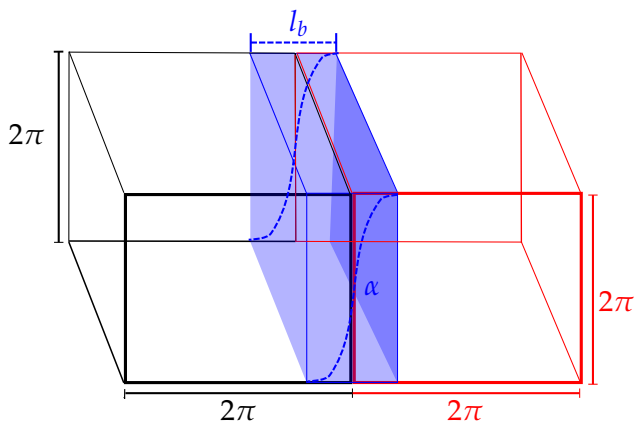


Figure 6.5. *Représentation schématique de concaténation de deux cubes issus de DTHI.*

Le terme $\partial\varphi/\partial x_i$ est utilisé pour éliminer des erreurs parasites dues à la dilatation du nouveau champ. Nous avons choisi la forme suivante pour α :

$$\alpha = \frac{\pi}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi x_1}{2 l_b}\right)\right), \quad \text{avec} \quad |x_1| \leq l_b. \tag{6.38}$$

Le champ concaténé induit une dilatation parasite éliminée en résolvant l'équation de Poisson suivante [155] :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j \partial x_j} = \left(-u_i^{(1)} \sin(\alpha) + u_i^{(2)} \cos(\alpha)\right) \frac{d\alpha}{dx_1}, \tag{6.39}$$

avec comme condition limite une condition de Neumann dans la direction x_1 et des conditions périodiques dans les directions x_2 et x_3. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à la note technique de Xiong *et al.* [281].

3. La troisième méthode consiste à réaliser une simulation de DTHI sur une boite suffisamment large dans la direction longitudinale x_1. Un exemple d'une boite de taille $[0,16\pi] \times [0,2\pi]^2$ est présenté sur la Figure 6.6.

Nous avons testé les trois méthodes, et nous avons trouvé qu'elles donnent approximativement les mêmes résultats. Une revue des méthodes d'injection de fluctuations de Wu [280]

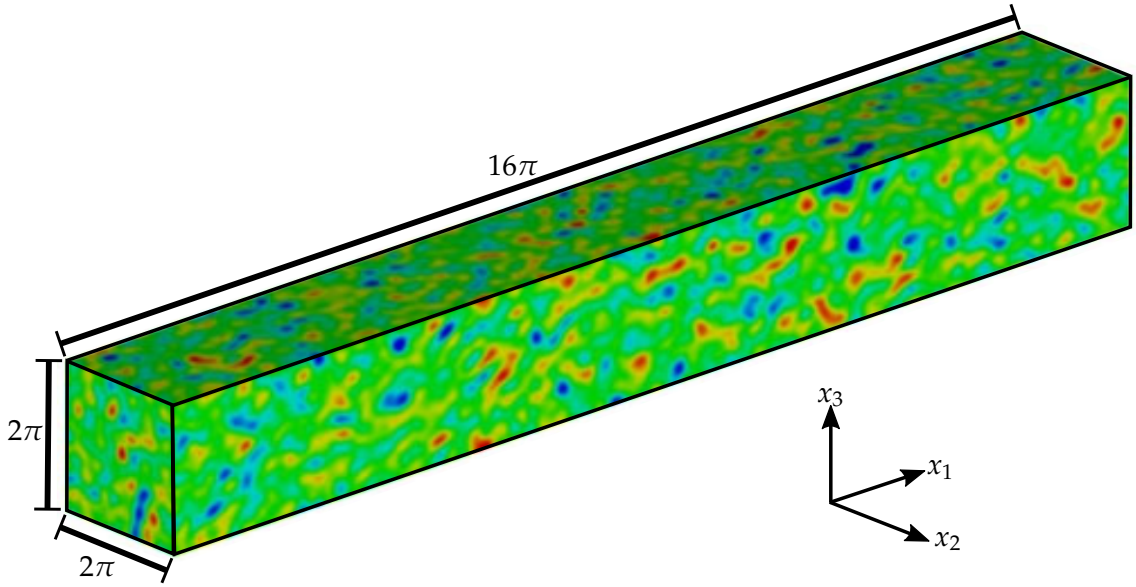


Figure 6.6. *Champ de vitesse issu d'une simulation de DTHI de taille* $[0,16\pi] \times [0,2\pi]^2$

confirme ce constat. La méthode qui sera retenue dans le cadre de ce travail est la troisième. Les grandeurs que nous imposons à l'entrée ont pour relations :

$$\begin{cases} \rho &= \rho_\infty + \rho' \\ u_1 &= U_\infty + u_1' \\ u_2 &= u_2' \\ u_3 &= u_3' \\ P &= P_\infty + P' \end{cases} \tag{6.40}$$

Rappelons ici que les perturbations turbulentes "gelées" sont fonctions du temps grâce à l'hypothèse de Taylor permettant d'établir une relation d'équivalence entre les échelles de temps et les échelles de longueur des grandeurs fluctuantes. Cette hypothèse utilise le principe de turbulence "gelée", pour laquelle l'écoulement turbulent est convecté à la vitesse moyenne U_∞ quelle que soit l'échelle. Pour une grandeur fluctuante donnée ϑ', nous pouvons considérer que la boite d'alimentation entre dans le domaine de calcul physique principal à la vitesse d'injection U_∞ au fur et à mesure que le temps t de simulation augmente et nous écrivons ainsi :

$$\underbrace{\vartheta'(x_1 = 0, x_2, x_3, t)}_{\text{quantité injectée à l'entrée}} \cong \underbrace{\vartheta'(tU_\infty, x_2, x_3, t_{\text{stockage}})}_{\text{quantité issue de la DTHI}} \tag{6.41}$$

L'utilisation de l'hypothèse de Taylor reste admissible si les fluctuations de vitesse restent négligeables devant U_∞. On estime le taux de fluctuations $\boldsymbol{u}'/U_\infty$ maximal, pour assurer l'hypothèse de turbulence "gelée", est de 10% [170] [2]. Dans notre configuration, cette condition est bien vérifiée. En pratique, les perturbations sont évaluées en fonction du plan d'entrée qui

2. Plusieurs études ont été effectuées à ce sujet. Nous renvoyons le lecteur intéressé à l'article de Gledzer [93] et de Kahalerras *et al.* [138]

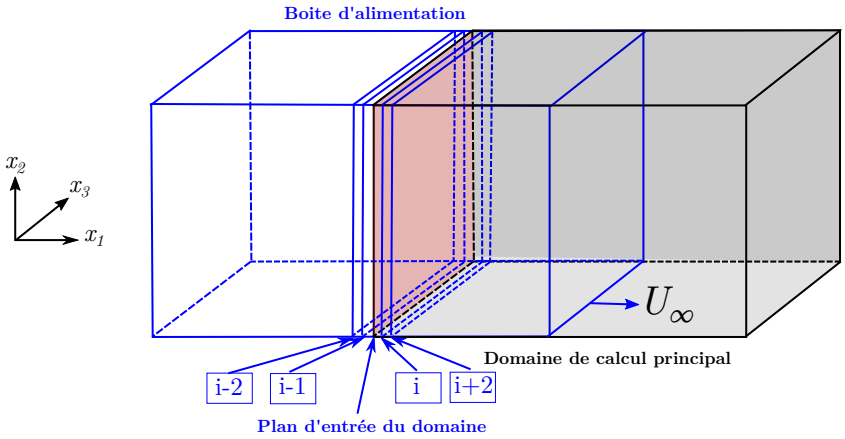


Figure 6.7. *Représentation schématique du procédé d'interpolation utilisé lors de l'alimentation du domaine de calcul en données turbulentes*

ne coïncide par forcément avec un plan de discrétisation. Les champs sur ce plan d'entrée sont ainsi évalués par l'intermédiaire d'une interpolation quadratique utilisant les 4 plans voisins $(i-2, i-1, i, i+1)$ comme illustré sur la Figure 6.7.

6.4.3 Condition de sortie

Les conditions aux limites non réfléchissantes de type NSCBC associées à une zone éponge absorbantes sont utilisées aux frontières du domaine afin de rendre possible la sortie des fluctuations aérodynamiques ou acoustiques sans réflexion notable. La zone éponge construite en sortie d'écoulement entre 3π et 4π est associée également à un étirement du maillage dans la direction longitudinale permettant une dissipation des structures turbulentes avant qu'elles n'atteignent la condition de sortie et produisent des ondes acoustiques parasites. Dans la formulation de la zone éponge définie par l'équation (3.38), nous avons à régler deux paramètres (n et σ_m). La valeur de n est fixé à 2 [104, 174] et σ_m à $k_0 U_\infty/(2\pi)$ [153]. Larsson et Lele [153] ont proposé une version raffinée de conditions non réfléchissantes permettant d'assurer que la pression moyenne à la sortie reste proche d'une valeur donnée p_∞, et ce afin d'assurer la stationnarité du choc droit. Dans le cas de notre configuration, nous devons nous assurer que p_∞ reste proche de p_2 calculée à partir des relations de Rankine-Hugoniot fixées pour M_1 et $P_1 = P_\infty$. Pour ce faire, nous supposons tout d'abord que l'écoulement est purement laminaire avec comme conditions à l'amont du choc $(u_{1,u}, P_u)$ et à l'aval $(u_{1,d} = U_\infty, P_d)$. Si le choc se déplace vers la sortie du domaine à la vitesse U_s, les relations de Rankine-Hugoniot fournissent la relation de saut du rapport de pression sous la forme suivante :

$$\frac{P_d}{P_u} = 1 + \frac{2\gamma}{\gamma+1}\left(-1 + \frac{(u_{1,u} - U_s)^2}{c_u^2}\right), \tag{6.42}$$

où c_u est la vitesse du son à l'amont du choc. Nous avons dans ce cas $p_\infty = P_d$. Pour un écoulement turbulent, la relation (6.42) n'est valide qu'au sens instantané et non sur l'ensemble de la durée de la simulation. Lele [159] a développé des relations de saut pour des écoulements

turbulents en se basant sur la théorie de la distortion rapide RDT et il a trouvé que le saut de la pression et de la masse volumique diminue par rapport au cas laminaire en présence de la turbulence pour un nombre de Mach de choc donné. Dans ce cas, nous avons $p_\infty \neq P_d$ et la détermination de p_∞ est plus compliquée. Notons $p_{\infty,\text{initial}}$ et $U_{s,\text{initial}} = U_s$ provenant du calcul laminaire et essayons de corriger cette valeur pour tenir compte du caractère turbulent de l'écoulement. Cette correction sera effectuée en utilisant un maillage moins raffiné pour plus de rapidité. La différenciation de la relation (6.42) par rapport à p_d et U_s permet d'obtenir une relation entre les petites perturbations δp_d et δU_s :

$$\frac{\delta p_d}{p_u} = -\frac{4\gamma U_s}{c_u^2(\gamma+1)}\delta U_s. \tag{6.43}$$

Nous supposons de plus que $\delta p_d \approx \delta p_\infty$ et $\delta U_s \approx -U_{s,\text{initial}}$, et nous obtenons ainsi une correction de la pression à imposer à la sortie sous la forme :

$$\begin{aligned} p_\infty &= p_{\infty,\text{initial}} + \delta p_\infty \\ &\approx p_{\infty,\text{initial}} + \tfrac{4p_u U_{s,\text{initial}}\gamma}{c_u^2(\gamma+1)} U_{s,\text{initial}} \\ &= p_{\infty,\text{initial}} + \tfrac{4\rho_u u_{1,u}}{\gamma+1} U_{s,\text{initial}} \end{aligned} \tag{6.44}$$

Nous pouvons réitérer cet ajustement de la pression p_∞, surtout pour les valeurs les plus élevées du nombre de Mach turbulent, pour le cas des bas nombres de Mach turbulent, la valeur $U_{s,\text{initial}}$ est très proche de zéro, auquel cas une seule application de la correction est suffisante.

6.4.4 Paramètres de la simulation

Les simulation de l'interaction entre une onde de choc et un écoulement turbulent seront conduites avec les Mach amont $M_1 = 1.7, 1.9, 2.0, 2.1$ et 2.3. Pour un nombre de Mach amont fixé, les paramètres de calculs sont identiques. Ces paramètres sont regroupés dans le Tableau 6.4.

Cas	A	B	C
Domaine	$4\pi \times (2\pi)^2$	$4\pi \times (2\pi)^2$	$4\pi \times (2\pi)^2$
Maillage	750×256^2	750×256^2	750×256^2
M_1	1.70	2.00	2.30
${k_0}^2$	4.00	4.00	4.00

Tableau 6.4 *– Paramètres des différents calculs d'interaction choc-turbulence.*

Pour s'assurer qu'un nombre suffisant de points de maillage soit situé au voisinage de la discontinuité et pour éviter des oscillations parasites et résoudre au mieux la dissipation en aval, un raffinement de maillage est effectué dans le voisinage immédiat de la position du choc. Physiquement, le choix des schémas numériques et le maillage, doivent à la fois :

- représenter correctement les petites structures de l'écoulement en engendrant le moins

de dissipation numérique possible ;

- résoudre les discontinuités avec une robustesse semblable aux schémas à capture de choc (*shock capturing*). L'épaisseur typique d'un choc est de l'ordre du libre parcours moyen [39]. Numériquement, il est donc très difficile de résoudre correctement un choc, et son épaisseur est fixée par le maillage.

L'utilisation des schémas WENO (appartenant à la famille des méthodes dites *shock fitting*) répond bien à ses exigences. En effet, Liska et Wendroff [165] ont présenté une comparaison de huit schémas aux différences finies pour la résolution des lois de conservation hyperboliques. Ils ont montré que les schémas WENO, bien que coûteux en temps CPU, sont plus robustes et donnent des résultats précis. En plus, dans le cas du problème qui nous intéresse, l'inconvénient majeure des méthodes de *shock fitting* (elles reposent principalement sur un maillage adaptatif qu'on construit de telle sorte à faire coïncider la position du choc avec un nœud de maillage) ne se pose pas, car la topologie du choc est presque figée et plane à quelques mailles près. Pour une bonne description du problème d'interaction choc-turbulence, les deux exigences citées nécessitent que les plus petits tourbillons, de taille comparable à l'échelle de longueur de Kolmogorov η_K, soient plus grands que l'épaisseur numérique du choc δ_S. Pour l'ensemble des présentes simulations, les calculs ont été effectués sur un maillage étiré de manière significative dans la direction normale à l'onde du choc de telle sorte que le pas de discrétisation longitudinale $\Delta x_{1,s}$ aux alentours du choc (et derrière) soit approprié pour décrire la turbulence post-choc compressée.

A l'entrée du domaine de calcul, où la turbulence est injectée, la résolution spatiale est définie en fonction de $\eta_K/\Delta x_{1,i} = 3/2$. La discrétisation est homogène à l'entrée (*i.e.*, $\Delta x_{1,i} = \Delta x_{2,i} = \Delta x_{3,i}$) mais l'espacement du maillage Δx_1 est progressivement diminué dans la direction normale au choc de référence en utilisant la fonction d'étirement donnée par l'équation (6.47). Il est réduit de telle manière que, à l'emplacement du choc, l'échelle de longueur de Kolmogorov η_K est approximativement égale à $8\Delta x_{1,s}$. L'épaisseur de choc numérique, telle qu'elle résulte de l'activation du schéma WENO non linéaire, est quant à elle approximativement égale à $4\Delta x_{1,s}$. Ceci confirme que l'épaisseur du choc numérique δ_S reste bien inférieure à l'échelle de longueur de Kolmogorov η_K. Le critère de séparation d'échelle, tel que décrit par Ryu et Livescu [231], est donc bien vérifié. Nous avons également utilisé un maillage évolutif pour ne pas engendrer des oscillations parasites en adoptant un raffinement du maillage suivant la direction longitudinale. Nous gardons un maillage uniforme suivant la direction transversale identique à celui du parallélépipède d'alimentation pour éviter des

1. Ce choix est basé sur la limitation selon laquelle deux points sont minimum nécessaires pour résoudre correctement une structure turbulente. Cette limitation se traduit par le critère :

$$\eta > 2\max\{\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3\} \tag{6.45}$$

En sachant que $\eta \simeq (\nu^3/\epsilon)^{1/4}$, le critère de l'équation (6.45) s'écrit alors

$$Re_\lambda \leq \frac{1}{\sqrt{15}}\left(\frac{N_{x_2}}{k_0 L_{x_2}}\right)^2 \tag{6.46}$$

2. le nombre d'onde le plus énergétique défini dans l'équation (6.33)

éventuelles interpolations des points du parallélépipède d'injection à l'entrée. Nous utilisons à cette fin une transformation permettant de raffiner progressivement suivant la formule (6.47) :

$$x_1(s) = L_{x_1}\left(\frac{rs + \frac{r-d}{2b}\log\phi_1(s)}{r + \frac{r-d}{2b}\log\phi_2}\right) \tag{6.47}$$

avec

$$\phi_1(s) = \frac{\cosh\left(b\left(s - \frac{3c}{2}\right)\right)\cosh\left(\frac{bc}{2}\right)}{\cosh\left(b\left(s - \frac{c}{2}\right)\right)\cosh\left(\frac{3bc}{2}\right)}, \quad \phi_2 = \frac{\cosh\left(b\left(1 - \frac{3c}{2}\right)\right)\cosh\left(\frac{bc}{2}\right)}{\cosh\left(b\left(1 - \frac{c}{2}\right)\right)\cosh\left(\frac{3bc}{2}\right)} \tag{6.48}$$

où s est une coordonnée variant de façon uniforme entre 0 et 1. Les variables r et d sont respectivement représentatives de Δx_1 aux bords du domaine et sur le choc (autour de c). Les quantités b et d permettent de spécifier l'étendue du domaine sur lequel nous raffinons le maillage. Ces constantes sont choisies de telle sorte qu'à l'entrée nous ayons $(\Delta x_1)_{\text{entrée}} = \Delta x_2 = \Delta x_3$ et un raffinement $\max \Delta x_1 \approx 5 \min \Delta x_1$ au niveau de la discontinuité. Nous appliquons ce raffinement sur le domaine $L_{x_1}/2$ (avec les paramètres $c = 0.5$, $r = 10.0$, $d = 0.01$ et $b = 3.45$ obtenus par essais successifs), alors que dans le reste du domaine de calcul nous appliquons deux raffinements linéaires. La Figure 6.8 représente la variation du pas d'espace issue du raffinement.

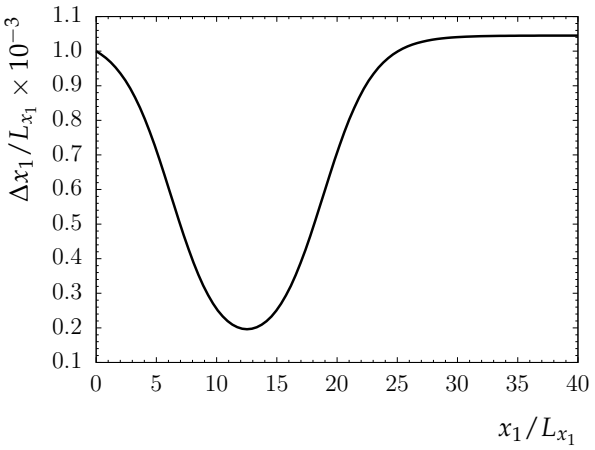


Figure 6.8. *Évolution du pas d'espace obtenu avec le maillage évolutif utilisé dans la direction longitudinale des calculs d'interactions choc-turbulence*

Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous avons exposé le détail de la mise en place d'une base de données pour le problème d'interaction choc-turbulence basée sur des simulations numériques directes DNS. Cette base comprend trois intensités de choc, i.e. trois valeurs de Mach amont ($M_1 =$ 1.7, 2.0 et 2.3. Une attention particulière a été apporté à la façon d'injecter de turbulence dans le domaine de calcul ainsi qu'à la définition du maillage pour une meilleure résolution des petites structures de turbulence et une bonne résolution de la discontinuité induite par l'onde de choc.

7

Résultats de la simulation numérique directe pour l'interaction choc-turbulence

Mini-sommaire

7.1 Vérification de la simulation numérique directe **118**
7.2 Énergie cinétique turbulente **125**
7.3 Évaluation de l'enstrophie **130**
7.3.1 Bilan de vorticité 132
7.3.2 Interaction entre vorticité et déformation 132
7.3.3 Angle entre enstrophie et déformation 138
7.3.4 Production d'enstrophie 139
7.4 Structure locale de la turbulence **140**
7.5 Évolution des échelles de longueur **144**

Ce chapitre rassemble les résultats de DNS concernant la configuration d'interaction entre une onde de choc plane et une turbulence homogène isotrope. Un des objectifs de ce chapitre réside dans la vérification et l'amélioration des connaissances récemment acquises sur ce type d'écoulements. Ces données ont été obtenues avec l'outil numérique CREAMS que nous avons précédemment présenté au chapitre §3. L'essentiel de notre analyse portera sur les modifications subies par l'écoulement turbulent à la traversée du choc. Nous nous intéresserons donc aux principales statistiques de la turbulence en insistant sur les mécanismes physiques élémentaires responsables des évolutions observées. L'examen des bilans associés aux différentes statistiques étudiées constituera la source d'information essentielle. Nous comparerons les données obtenues pour trois valeurs du nombre de Mach convectif ($M_1 = 1.7,\ 2.0$ et 2.3) quand l'accent sera mis sur l'influence du Mach d'entrée, sinon quand il s'agira de montrer un résultat qualitatif, seul le cas de référence ($M_1 = 1.7$) sera considéré.

Les travaux présentés ici ont fait l'objet d'une publication dans *Shock Waves* [27] et ont été également présentés au colloque *ICDERS* en 2017 [26].

7.1 Vérification de la simulation numérique directe

La Figure 7.1 met en évidence les caractéristiques qualitatives principales du développement d'une turbulence interagissant avec un choc à travers un champ instantané du critère λ_2. Cette figure souligne la richesse topologique de l'écoulement ainsi que l'activité de la turbulence dans la région en aval du choc. En effet, elle montre l'enroulement des tourbillons permettant d'identifier localement les structures tourbillonnaires cohérentes. Le critère d'identification des tourbillons λ_2 utilisé correspond à la valeur propre la plus négative associée au tenseur $\mathcal{S}_{ij}^2 + \mathscr{W}_{ij}^2$, où $\mathcal{S}_{ij}$ et $\mathscr{W}_{ij}$ sont les parties symétrique et antisymétrique du tenseur du gradient de vitesse, respectivement (cf. paragraphe §7.3.2 pour plus de détails). D'autres critères sont également utilisés dans la littérature pour visualiser les structures turbulentes, *e.g.*, les iso-contours de pression ou le critère Q. Plusieurs auteurs [87, 129, 130] considèrent que les critères Q et λ_2 sont souvent équivalents. Sur la Figure 7.1, nous pouvons visualiser le changement drastique des structures tourbillonnaires observé à la traversée du choc normal. De même, nous visualisons le changement des orientations des tourbillons et l'amplification de l'enstrophie juste en aval du choc. Plus en aval du choc, les structures tourbillonnaires tendent à reprendre leur caractère isotrope et leur orientations aléatoires, identiques à celles observées en amont du choc.

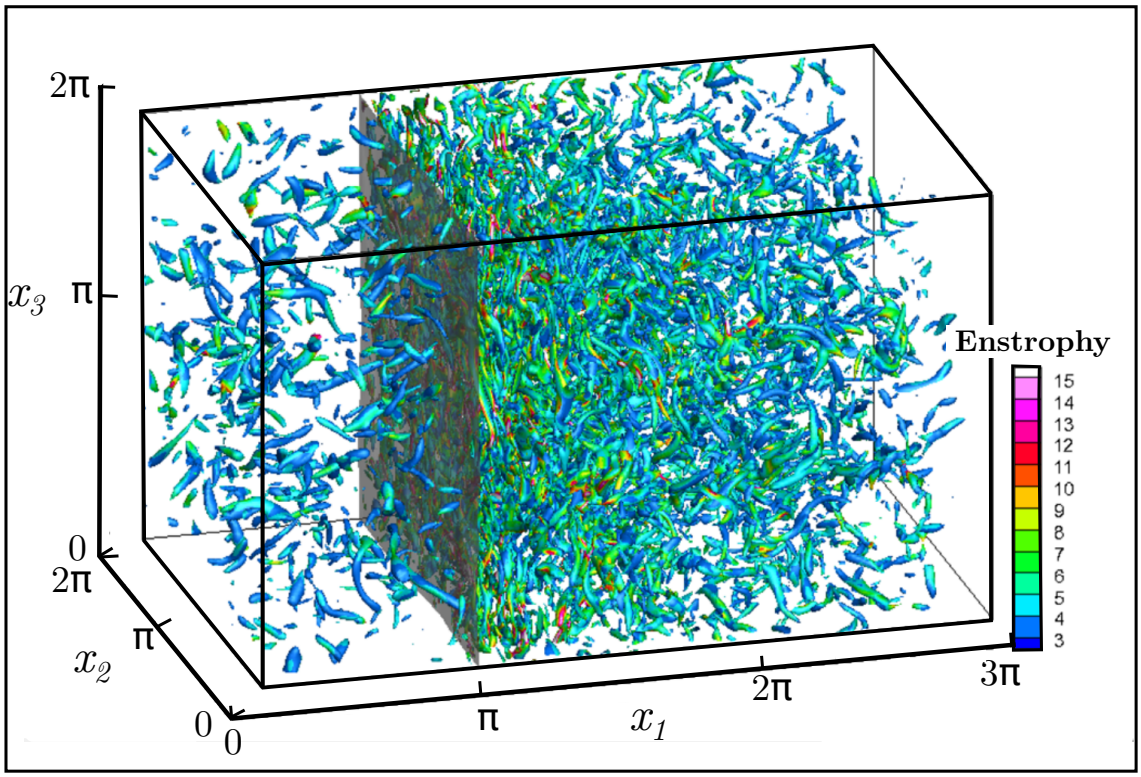


Figure 7.1. *Iso-contour de* λ_2 ($\lambda_2 = 0.07 \max(\lambda_2)$ coloré par la norme de l'enstrophie, le choc est identifié par un iso-contour négative de la dilatation colorée par la pression.

Nous précisons à ce stade que les caractéristiques de l'écoulement turbulent obtenu juste en amont immédiat du choc. C'est en effet ces caractéristiques turbulentes qui vont interagir avec la discontinuité. Le Tableau 7.1 reporte les statistiques principales associées aux

fluctuations turbulentes en question.

Cas	A	B	C
M_1	1.70	2.00	2.30
M_t	0.171	0.172	0.172
Re_λ	21.0	21.0	21.0
$\mathcal{S}$	-0.43	-0.43	-0.43
$\mathcal{T}$	3.42	3.42	3.43
$u'_{1,rms}/U_\infty$	0.076	0.088	0.93
$\rho'_{1,rms}/\rho_\infty$	0.083	0.084	0.084
$p'_{1,rms}/P_\infty$	0.113	0.114	0.114

Tableau 7.1 *– Paramètres des différents calculs d'interaction choc/turbulence à l'amont immédiat du choc.*

On note ici que la turbulence injectée est faiblement compressible puisque M_t est voisin de 0.21. Elle ne présente pas de structures de chocs locaux ou *shocklets* qui apparaissent habituellement quand des tourbillons énergétiques présentent des fluctuations de vitesse supérieurs à la vitesse de son. Ces chocs vont activer excessivement le schéma non linéaire WENO et conduire à une grande dissipation numérique causant par la suite des erreurs numériques drastiques dans certains cas [19, 161]. En outre, d'après le Tableau 7.1, nos simulations vérifient bien la relation $M_t < a(M_1^2 - 1)$, où a est de l'ordre de 0.1. Cette relation issue des simulations numériques réalisées par Lee *et al.* (1993) [156], assure que le front de la discontinuité reste bien défini au cours des simulations dans le sens où l'onde de choc subit des déformations suite aux flucturations turbulentes qui le traversent sans que sa structure interne ne soit affectée.

Pour rappel, dans le problème qui nous intéresse, on utilise successivement deux types de moyennes. Dans un premier temps, on utilise la propriété d'homogénéité de l'écoulement dans les deux directions transverses au choc suivant lesquelles nous appliquons la moyenne spatiale. Ensuite, comme l'écoulement turbulent est également statistiquement stationnaire, on effectue une moyenne dans le temps de différents champs instantanés stockés au cours de la simulation. Les moyennes sont calculées suivant la moyenne de Reynolds ou de Favre suivants les deux expressions suivantes :

$$\overline{\varphi}(x_1) = \frac{\int_{t_i}^{t_f}\int_0^{L_{x_2}}\int_0^{L_{x_3}} \varphi(x_1,x_2,x_3,t)\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\mathrm{d}t}{\int_{t_i}^{t_f}\int_0^{L_{x_2}}\int_0^{L_{x_3}} \mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\mathrm{d}t}, \tag{7.1}$$

et

$$\widetilde{\varphi}(x_1) = \frac{\int_{t_i}^{t_f}\int_0^{L_{x_2}}\int_0^{L_{x_3}} \rho\varphi(x_1,x_2,x_3,t)\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\mathrm{d}t}{\int_{t_i}^{t_f}\int_0^{L_{x_2}}\int_0^{L_{x_3}} \rho(x_1,x_2,x_3,t)\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\mathrm{d}t}. \tag{7.2}$$

avec t_i et t_f le temps initial et final de la prise de donnés de la base statistique. Pour les simulations que nous avons effectuées, le nombre d'échantillons pris dans chaque plan transversal ($x_1 = \text{Cste}$) pour la moyenne spatiale est 256×256. On complète ensuite par une moyenne dans le temps portant sur 2000 champs instantanés. Ces derniers sont stockés à intervalles de temps régulièrement répartis sur une durée $\Delta t = 80/k_0 u_{1,u}$. On veille par ailleurs

à ce que le calcul des statistiques ait lieu une fois que l'écoulement a effectivement atteint un état statistiquement stationnaire. On ne commence donc le stockage des champs instantanés qu'après une période transitoire correspondant au temps où l'écoulement a traversé trois fois le domaine longitudinal avec la vitesse d'advection moyenne $u_{1,u}$. En outre, l'influence du nombre de champs retenus dans le calcul des statistiques temporelle a été testée : on n'a pas constaté de différence notable entre les statistiques obtenues avec 2000 et 3000 champs.

Évolution des facteurs de dissymétrie

Nous montrons l'évolution longitudinale des facteurs de dissymétrie $\mathcal{S}_{ii}$, $i = 1,2,3$ sur la Figure 7.2. Nous constatons que la valeur juste en amont du choc correspond bien à une turbulence bien développée. La décroissance spatiale de la turbulence est ainsi bien validée, ceci confirme que les champs turbulents à l'entrée du domaine principal sont proprement injectés.

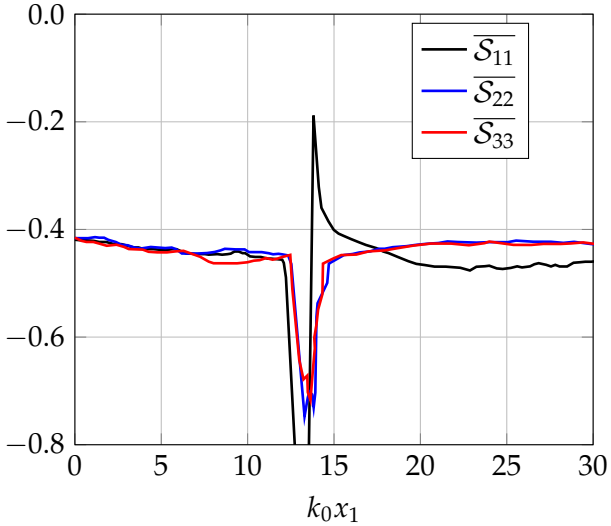


Figure 7.2. *Évolution longitudinale du facteur de dissymétrie pour le cas de référence* $M_1 = 1.7$

Évolution des profils moyens à travers le choc

Nous disposons initialement d'un écoulement moyen auquel nous ajoutons des perturbations qui vont devenir turbulentes. Les profils des quantités moyennes normalisées par leurs valeurs en amont sont présentés sur la Figure 7.3. Le choc étant stationnaire en moyenne, nous observons toutefois que l'épaisseur de la discontinuité augmente légèrement et diffuse un peu plus qu'en écoulement laminaire. Nous constatons également que les différents profils présentent des écarts très faibles (d'un ordre inférieur à 1%) par rapport aux résultats obtenus avec un écoulement laminaire correspondant également aux relations de saut de Rankine-Hugoniot. La Figure 7.3(d) souligne une légère diminution de la vitesse moyenne longitudinale par rapport à celle obtenue en aval dans le cas laminaire. Comme l'ont déjà montré Lee *et al.*, Lee *et al.* [156, 157] et Lele [160], la zone immédiatement en aval de l'onde

de choc est caractérisée par des échanges énergétiques de natures diverses. Notons qu'à la différence des précédents études de ce type de configuration d'interaction choc-turbulence où γ est considéré constante et égale à 1.4, le rapport des capacités thermiques dépend ici de la température et subit lui aussi une légère diminution à la traversée du choc.

Analyses des corrélations entre deux points

Afin de simuler l'écoulement turbulent canonique en interaction avec un choc normal, plusieurs choix ont été faits (domaine périodique, discrétisation spatiale). Ceux-ci sont vérifiés *a posteriori* notamment grâce à l'analyse des corrélations en deux points et à l'étude spectrale.

L'emploi de conditions périodiques se justifie par la propriété d'homogénéité dans la direction transverse seulement si le domaine de calcul principal est suffisamment long dans les deux directions de périodicité x_2 et x_3 pour contenir les plus grandes structures. Afin de vérifier que la taille du domaine est suffisamment grande dans les deux directions d'homogénéité x_2 et x_3, i.e. selon le sens de l'envergure, où les conditions de périodicité sont appliquées, l'évaluation de la corrélation en deux points est calculée dans un plan x_1 =Cste en amont de la discontinuité et effectuée selon la procédure indiquée par O'neill *et al.* [202] et Lee *et al.* [156]. La corrélation en deux points d'une quantité f dans la direction x_2 s'exprime en réécrivant l'équation (6.1) comme :

$$\mathcal{R}_{2,f} = \frac{\overline{f'(x_1,x_2,x_3,t)f'(x_1,x_2+\Delta x_2,x_3,t)}}{\overline{f'(x_1,x_2,x_3,t)f'(x_1,x_2,x_3,t)}}. \tag{7.3}$$

La moyenne est effectuée spatialement suivant la direction x_3 suivie d'une moyenne temporelle. Pour éviter une possible contamination numérique liée à un domaine de calcul insuffisamment long selon la direction de périodicité, la relation (7.3) doit tendre vers zéro au fur et à mesure que Δx_2 augmente, i.e. pour les grandes séparations. La Figure 7.4 montre les corrélations des composantes de vitesse ainsi que celle de la masse volumique et de la pression dans le plan $k_0 x_1 = 11.4$ situé à l'amont du choc. Le comportement général de ces courbes montre une diminution effective de la corrélation. La corrélation $\mathcal{R}_{2,u_2}$ décroît de façon monotone à zéro lorsque Δx_2 tend vers $L_{x_2}/2 = \pi$. De même, $\mathcal{R}_{2,u_1}$ et $\mathcal{R}_{2,u_3}$ atteignent un niveau nul pour des grandes séparations et sont égales pour de faibles intervalles de séparation. Les corrélations de la pression $\mathcal{R}_{2,p}$ et la masse volumique $\mathcal{R}_{2,\rho}$ présentent également des comportements très similaires pour des petites valeurs de Δx_2. Nous pouvons ainsi déduire de ces comportements que la taille du domaine est suffisante pour représenter l'ensemble des phénomènes physiques associés à l'écoulement turbulent considéré.

Analyse spectrale

La qualité de la résolution obtenue pour l'écoulement turbulent est évaluée par le biais d'une analyse spectrale. Dans ce but, nous définissons la fonction des corrélations croisées

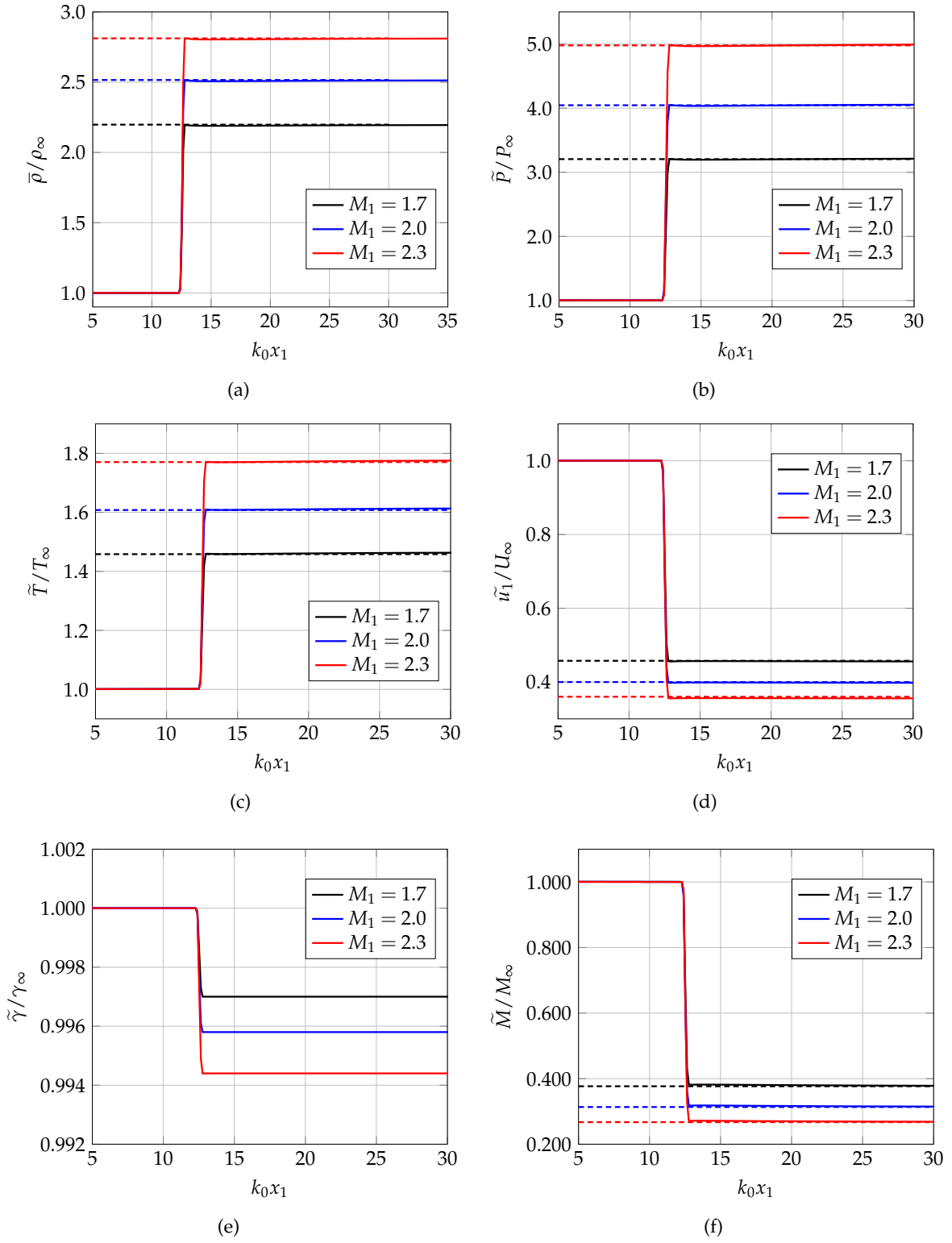


Figure 7.3. *Évolution longitudinale de la masse volumique (a), la pression (b), la température (c), la vitesse moyenne suivant x_1 (d), le rapport des capacités calorifiques (e) et le Mach (f). Les traits pointillés (——) représentent les valeurs obtenues en aval dans le cas laminaire.*

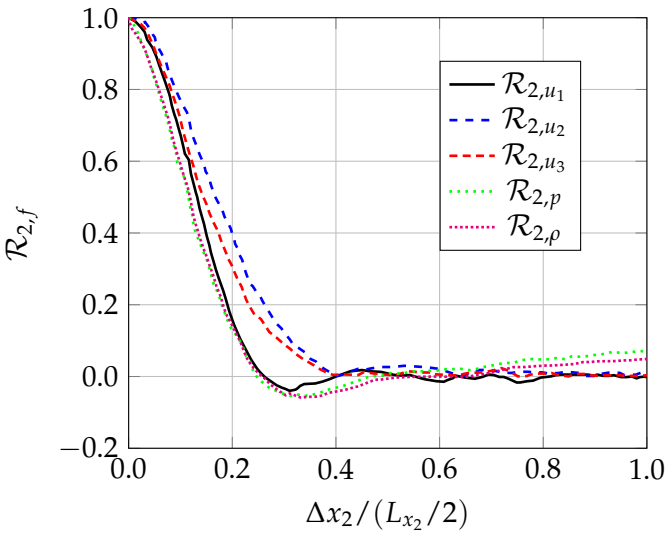


Figure 7.4. *Corrélations en deux points pour le cas de référence $M_1 = 1.7$*

$R_{ij}(\boldsymbol{r}) = u(\mathbf{x})u(\mathbf{x}')$ avec $\boldsymbol{r} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$.

$$E_{ij}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} e^{-i.\boldsymbol{\kappa}.\mathbf{r}} R_{ij}(\mathbf{r}) \mathrm{d}r. \tag{7.4}$$

Pour une turbulence isotrope et incompressible, il est possible de démontrer que le tenseur $E_{ij}(\boldsymbol{\kappa})$ est symétrique et prend la forme analytique suivante :

$$E_{ij}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{E(\boldsymbol{\kappa})}{\pi\kappa} \left(\delta_{ij} - \frac{\kappa_i \kappa_j}{\kappa^2} \right). \tag{7.5}$$

La forme des spectres de vitesse monodimensionnels est définie comme suit :

$$E_{ii}(\kappa_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} E_{ii}(\boldsymbol{\kappa}) \mathrm{d}\kappa_1 \mathrm{d}\kappa_3 \tag{7.6}$$

Pour une turbulence homogène isotrope incompressible, il existe une relation analytique entre les spectres monodimensionnels de vitesse [118, 58] qui s'écrit

$$E_{22}(\kappa_2) - 2E_{11}(\kappa_2) = \kappa_2 \frac{\partial E_{22}(\kappa_2)}{\partial \kappa_2}, \tag{7.7}$$

avec $E_{11}(\kappa_2) = E_{33}(\kappa_2)$. La Figure 7.5 présente les spectres monodimensionnels d'énergie cinétique turbulente calculés au même endroit que la fonction de corrélation. Tous les spectres présentent un comportement attendu de turbulence homogène isotrope, et nous pouvons non seulement comparer $E_{11}(\kappa_2)$ et $E_{33}(\kappa_2)$, mais également $E_{11}(\kappa_2)$ obtenu par le calcul à partir des champs instantanés et $E_{11}(\kappa_2)$déduit de $E_{22}(\kappa_2)$ à partir de la relation (7.7).

Activation du schéma `WENO7` non linéaire

L'approche hybride utilisée dans la discrétisation des flux convectifs, qui combine le schéma `WENO7` et un schéma centré du même ordre de précision, nécessite l'emploi d'un

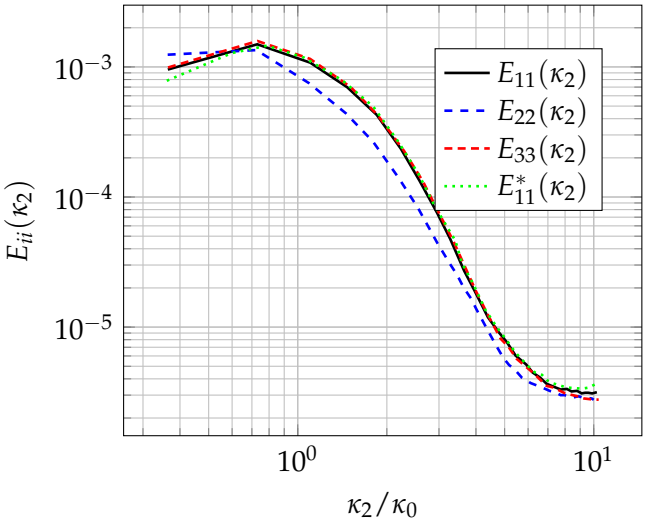


Figure 7.5. *Spectres monodimensionnels de vitesse pour le cas de référence $M_1 = 1.7$. $E^*_{11}(\kappa_2)$ est obtenu analytiquement à partir de $E_{22}(\kappa_2)$ suivant l'équation (7.7).*

critère additionnel afin de détecter les possibles discontinuités présentes dans l'écoulement. Comme indiqué dans la section 3.1.1, la détermination de ces discontinuités se fait à partir de l'évaluation simultanée des variations locales normalisées de pression et de masse volumique. La Figure 7.6 illustre l'application de ce critère avec $|\rho_{i+1} - \rho_i|/\rho_i > 15.0\%$ et $|p_{i+1} - p_i|/p_i > 15.0\%$. Dans les régions englobant les chocs, le schéma `WENO7` est utilisé tandis que le schéma centré est appliqué en dehors de ces dernières. La valeur de 15.0% est choisie par essais successifs et elle est retenue pour permettre de minimiser le déclenchement du schéma `WENO7` afin de minimiser la viscosité numérique introduite par le schéma tout en conservant la plus grande robustesse possible. Le schéma servant à capturer les chocs s'active principalement le long de la discontinuité imposée par les conditions de Rankine-Hugoniot.

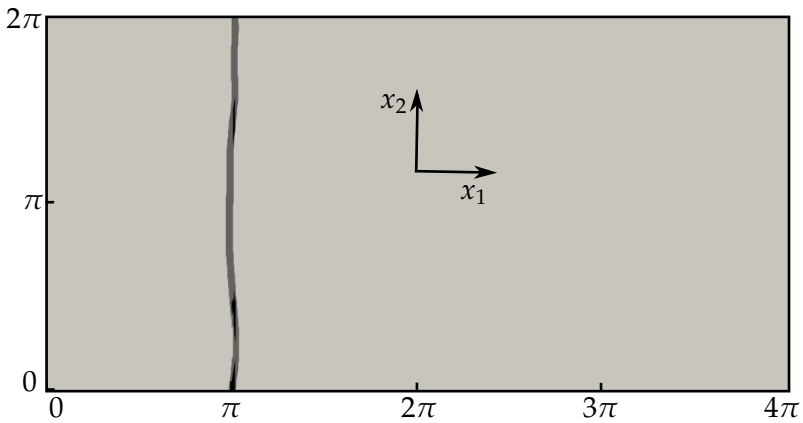


Figure 7.6. *Visualisation instantanée de la zone d'activation de la pondération non linéaire du schéma WENO*

7.2 Énergie cinétique turbulente

Nous commençons la description du phénomène d'interaction choc/turbulence en nous intéressant à la modification de l'énergie cinétique de turbulence à la traversée du choc. La figure Figure 7.7 reporte les termes diagonaux du tenseur de Reynolds définis par $R_{ij} = \widetilde{u_i'' u_j''}$. En amont de l'onde de choc, les composantes diagonales de ce tenseur décroissent lentement avant d'interagir avec le choc. Puis la composante R_{11} des tensions de Reynolds (Figure 7.13(a)) présente une augmentation rapide immédiatement en aval du choc situé juste en amont de la zone d'oscillations correspondant aux valeurs de x_1 pour lesquelles $\partial \widetilde{u_1}/\partial x_1 = 0$. Les deux autres composantes R_{22} et R_{33} diminuent de façon continue. R_{11} présente une augmentation rapide en aval de la zone d'oscillations de la discontinuité. Cette augmentation est due à un transfert d'énergie entre les modes acoustiques et rotationnels et à la redistribution d'énergie cinétique des deux composantes R_{22} et R_{33} vers R_{11} (cf. Lee *et al.* [157]).

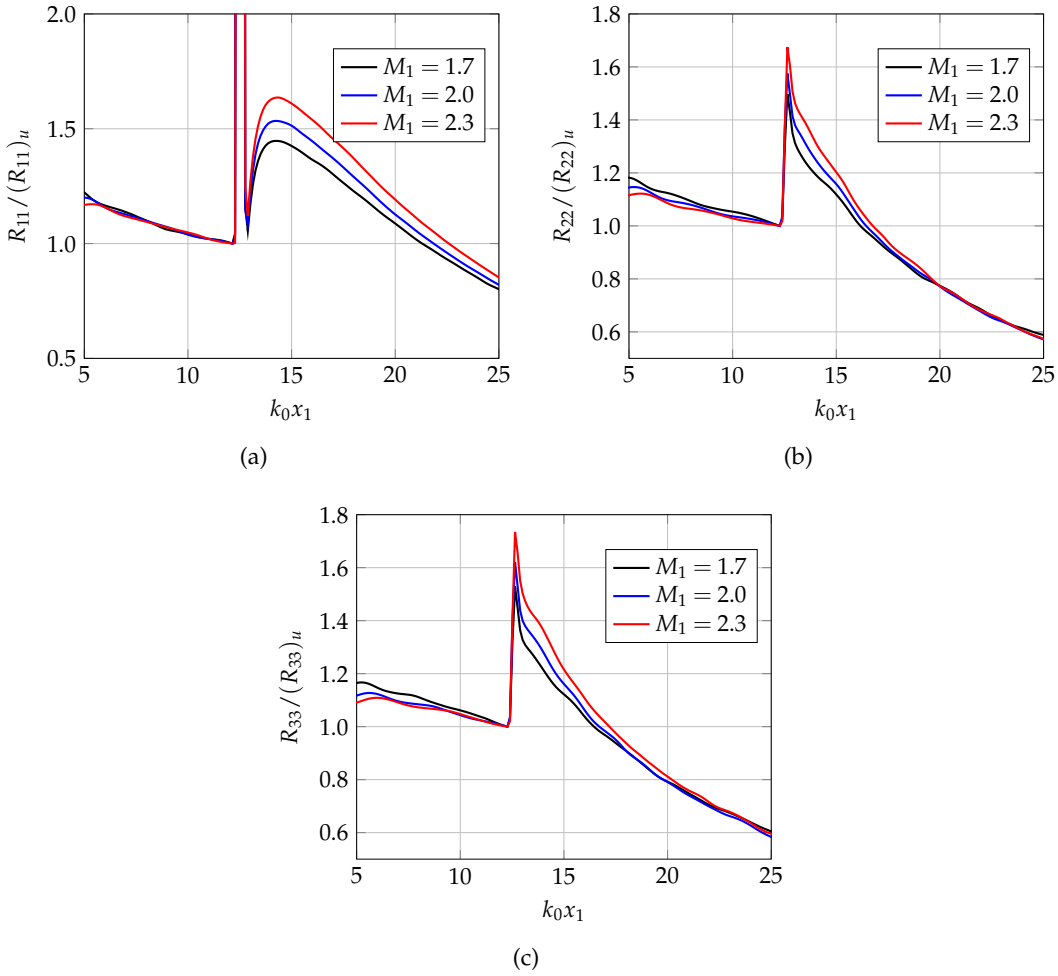


Figure 7.7. *Évolution longitudinale des contraintes de Reynolds normales normalisées par leurs valeurs à l'amont immédiat du choc.*

Le comportement observé pour la tension de Reynolds R_{11} se retrouve pour l'énergie cinétique turbulente $\mathcal{K} = (R_{11} + R_{22} + R_{33})/2$. Ainsi, en amont de l'onde de choc, l'énergie

cinétique $\mathcal{K}$ décroît continûment jusqu'à l'onde de choc, ensuite elle commence par augmenter dans une zone immédiatement en aval du choc avant de décroître lorsqu'on s'éloigne suffisamment de la zone de choc (champ lointain). L'évolution rapide non monotone que subit l'énergie cinétique à l'aval immédiat du choc s'explique par la corrélation entre les fluctuations de vitesse longitudinale et les fluctuations de pression [127].

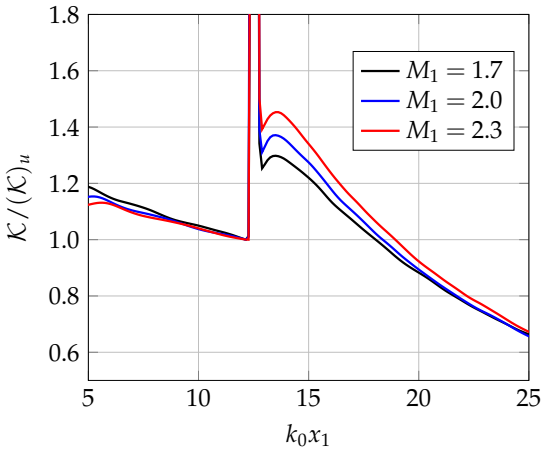


Figure 7.8. *Évolution de l'énergie cinétique turbulente $\mathcal{K}$ normalisée par sa valeur immédiatement en amont du choc $(\mathcal{K})_u$.*

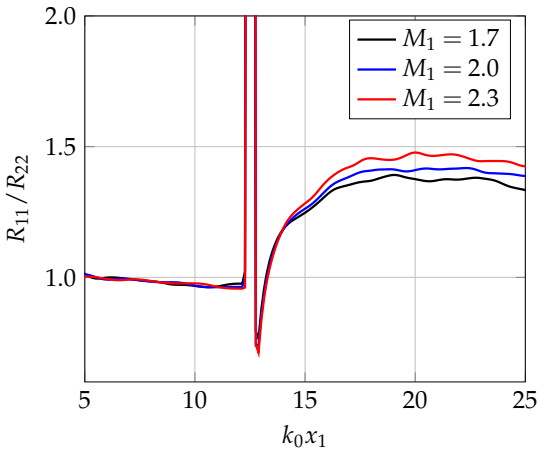


Figure 7.9. *Évolution du tenseur d'anisotropie R_{11}/R_{22}.*

L'anisotropie du tenseur de Reynolds R_{11}/R_{22} est présentée sur la Figure 7.9. Nous constatons que l'écoulement devient anisotrope et on note que $R_{11} > R_{22} \cong R_{33}$. Comme les composantes du tenseur de Reynolds sont amplifiées différemment à travers l'onde de choc, les modèles de turbulence à deux équations comme $k - \varepsilon$ ou $k - \omega$ ne peuvent pas reproduire cette anisotropie induite par le choc car ils modélisent seulement l'effet total de l'amplification sous la forme d'énergie cinétique turbulente $\mathcal{K}$. Les modèles basés sur les équations de transport des contraintes de Reynolds sont potentiellement adaptés pour capturer la turbulence anisotrope générée par le choc.

Pour étudier de plus près l'anisotropie induite par l'interaction de la turbulence avec le choc, nous définissons le tenseur déviateur du tenseur des contraintes de Reynolds :

$$\widetilde{b}_{ij} = \frac{\widetilde{\rho u_i'' u_j''}}{2\mathcal{K}} - \frac{\delta_{ij}}{3}. \tag{7.8}$$

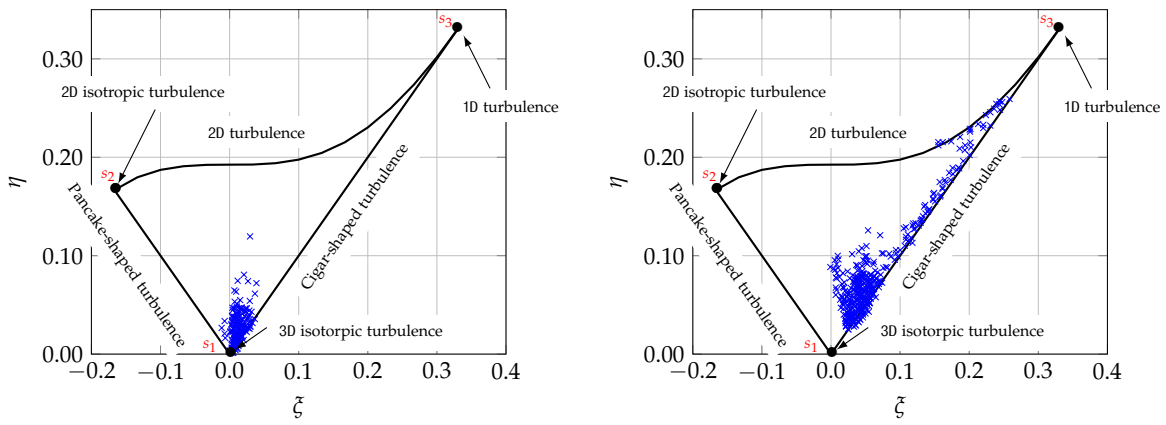
Ce tenseur, classiquement nommé tenseur d'anisotropie, mesure le degré d'anisotropie des contraintes de Reynolds. La cartographie des invariants de ce tenseur illustre la dynamique des écoulements complexes liés aux chocs et à leurs interactions avec les couches cisaillées et la turbulence. Par construction, le premier invariant de ce tenseur, *i.e.* sa trace, noté I_b, est nulle. Ce tenseur peut donc être étudié à l'aide de ces seuls invariants d'ordre 2 ($II_b = b_{ij}b_{ji}$) et d'ordre 3 ($III_b = b_{ik}b_{kj}b_{ji}$). Le domaine de variation des valeurs des invariants du tenseur $\widetilde{b}_{ij}$ est borné dans le plan (II_b, III_b). Cette caractéristique a été démontrée par Lumley (1979) [171] dans le plan (II_b^*, III_b^*) avec $II_b^* = -II_b/2$ et $III_b^* = III_b/3$. Dans ce nouveau repère, les couples (II_b^*, III_b^*) sont restreints à l'intérieur d'un triangle dit de Lumley. Les frontières de ce triangle décrivent les différents états du tenseur des contraintes turbulentes (cf. Figure 7.10). L'origine de ce plan représente l'état de turbulence isotrope. Le segment (s_2s_3) correspond à une turbulence à deux composantes (une des trois valeurs propres est nulle). Cette trajectoire est déterminée par la relation $1 - 9II_b^* + 27III_b^* = 0$. Les segments (s_1s_3), correspondant à $III_b^* = 2(II_b^*/3)^{(3/2)}$, et (s_1s_2), $III_b^* = -2(II_b^*/3)^{(3/2)}$, représentent une turbulence axisymétrique (deux valeurs propres égales). La distinction entre ces deux comportements est liée au signe du troisième invariant. Lorsque celui-ci est positif, la valeur propre axiale est prépondérante par rapport au deux autres composantes qui sont égales. On parle alors de structure en *cigare* (Cigar-Shaped turbulence). En revanche, lorsque III_b est négatif, ce sont les composantes radiales qui sont prépondérantes devant la composante axiale. On parle alors de structure en *disque*. Par soucis de visibilité, nous représentons les invariants dans le repère (II_b^*, III_b^*) avec $II_b^* = -II_b/2$ et $III_b^* = III_b/3$ ainsi que dans le repère (η, ξ) avec $\eta^2 = II_b^*/3$ et $\xi^3 = III_b^*/2$.

La Figure 7.10 présente les invariants du tenseur d'anisotropie dans le plan (η, ξ). Elle souligne que les résultats numériques évoluent bien dans les limites données par le triangle de Lumley. Les positions ainsi représentées sont majoritairement au centre de la zone caractéristique de l'isotropie en amont du choc. Pour les positions se trouvant en aval du choc, les échantillons se situent majoritairement au voisinage de la zone des structures en *cigare* qui correspond à une turbulence axisymétrique à une composante avec un pourcentage de 80% des échantillons se situant à $\xi \in [0.013 : 0.045]$.

Une variété d'approches théoriques s'est penchée sur la prédiction de l'effet de choc sur l'énergie cinétique, sur la vorticité et sur un certain nombre d'autres quantités. Néanmoins, la théorie de l'Analyse Linéaire de l'Interaction choc/turbulence reste aujourd'hui l'outil le plus performant quant à l'analyse d'interaction d'un choc avec un champ fluctuant isotrope. Une mesure largement utilisée de l'effet d'une onde de choc sur la turbulence est le facteur d'amplification défini comme étant le rapport entre la première composante du tenseur de Reynolds R_{11} à l'abscisse x_1 où il atteint son maximum à l'aval du choc et à l'abscisse juste à l'amont du choc. Le facteur d'amplification est ainsi défini par :

$$G = \frac{(R_{11})_d}{(R_{11})_u}. \tag{7.9}$$

En supposant que la variation du nombre de Mach en amont causée par les fluctuations tur-



(a) amont du choc (b) aval du choc

Figure 7.10. *Plans des invariants (η,ξ) pour le cas de référence $M_1 = 1.7$*

bulentes est modérée, l'épaisseur de choc δ_S peut être approchée par sa valeur en écoulement laminaire (Thompson [255]) et s'exprime par :

$$\delta_S = \mathcal{O}\left(\frac{\overline{\nu}}{\overline{c}\Delta M}\right), \tag{7.10}$$

où $\Delta M = M_1 - 1$. Avec la même hypothèse, l'échelle de Kolmogorov peut être approchée par :

$$\eta_K = \mathcal{O}\left(\frac{\overline{\nu}^{3/4}}{\overline{\epsilon}^{1/4}}\right). \tag{7.11}$$

Nous pouvons ainsi écrire :

$$\frac{\eta_K}{\delta_S} = \mathcal{O}\left(\frac{\overline{\nu}^{3/4}}{\overline{\epsilon}^{1/4}} \cdot \frac{\overline{c}\Delta M}{\overline{\nu}}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{u_{\text{rms}}}{\overline{\nu}^{1/4}\overline{\epsilon}^{1/4}} \cdot \frac{\overline{c}}{u_{\text{rms}}} \cdot \Delta M\right) = \mathcal{O}\left(\frac{u_{\text{rms}}}{u_k} \cdot \frac{\overline{c}}{u_{\text{rms}}} \cdot \Delta M\right), \tag{7.12}$$

où, d'après l'équation (6.10), l'ordre de grandeur de la vitesse de Kolmogorov est :

$$u_k = \frac{\eta_K}{\tau_k} = \mathcal{O}\left(\overline{\nu}^{1/4} \cdot \overline{\epsilon}^{1/4}\right). \tag{7.13}$$

Or, comme :

$$\frac{u_{\text{rms}}}{u_k} = \mathcal{O}\left(Re_t^{1/4}\right) = \mathcal{O}\left(Re_\lambda^{1/2}\right). \tag{7.14}$$

Nous pouvons ainsi écrire :

$$\frac{\eta_K}{\delta_S} = \mathcal{O}\left(Re_\lambda^{1/2} \cdot \frac{\Delta M}{M_t}\right). \tag{7.15}$$

De plus, il est connu que $\mathcal{L}_t/\eta_K = \mathcal{O}\left(Re_t^{3/4}\right) = \mathcal{O}\left(Re_\lambda^{3/2}\right)$, d'où l'estimation suivante :

$$\frac{\mathcal{L}_t}{\delta_S} = \frac{\mathcal{L}_t}{\eta_K} \cdot \frac{\eta_K}{\delta_S} = \mathcal{O}\left(Re_\lambda^2 \cdot \frac{\Delta M}{M_t}\right). \tag{7.16}$$

D'un point de vue physique, lorsque la turbulence interagit avec décélération moyenne rapide,

en l'occurrence un choc, un paramètre adimensionnel pertinent régissant l'interaction serait le rapport entre les échelles caractéristiques de la turbulence et celles du choc. Un tel paramètre de similarité peut être définie par $F = M_t/(\sqrt{Re_\lambda}\Delta M)$. Ce paramètre semble également être un choix naturel pour délimiter les différents régimes d'interaction choc-turbulence. Compte tenu que F est le rapport de l'épaisseur du choc laminaire à l'échelle de longueur Kolmogorov, pour des valeurs relativement faibles de F, nous nous attendons à ce que le choc soit soumis à un champ de vitesse relativement uniforme et se comportera donc comme un front quasi-laminaire, i.e. le régime "plissé" (*wrinkled*). D'autre part, pour une énergie cinétique $\mathcal{K}$ relativement grande, la turbulence peut perturber grandement le choc, créer de multiples pics de compression, c'est-à-dire le régime dit "cassé" (*broken*). Nous sommes sommes questionnés quant à la mise à l'échelle :

$$G = f(F). \tag{7.17}$$

La Figure 7.11 reporte les valeurs du facteur d'amplification G versus F en comparaison avec une collection du même facteur de la littérature. Il n'y a pas une tendance systématique indiquant que le nombre adimensionnel F est capable de caractériser de façon catégorique l'interaction d'un choc avec une turbulence. Néanmoins, les valeurs obtenues, pour des nombre de Mach à l'amont se situant dans la zone de transition qui a récemment été mise en évidence par Donzis [64], sont en bon accord avec les résultats de la littérature. La théorie LIA prédit effectivement une valeur de $G \approx 1.14$ pour $\gamma = 1.4$ [279], alors que selon les données de Figure 7.11, le facteur d'amplification obtenu pour les petites valeurs de F se situe au voisinage de $G \approx 1.6$. L'erreur commise, qui est de l'ordre de 40%, s'explique par le fait que la théorie LIA requiert, en plus de $F \to 0$, à la fois $Re_\lambda \to \infty$ et $M_t \to 0$. Dernièrement, Ryu et Livescu (2014) [231] ont montré que lorsque $F \approx \delta_S/\eta_K \to 0$, les résultats obtenus par des simulations directes convergent vers les solutions de la théorie LIA. Ils ont conduit un calcul d'interaction choc-turbulence pour des nombres de Mach turbulent très petits et un nombre Re_λ égal à 40.

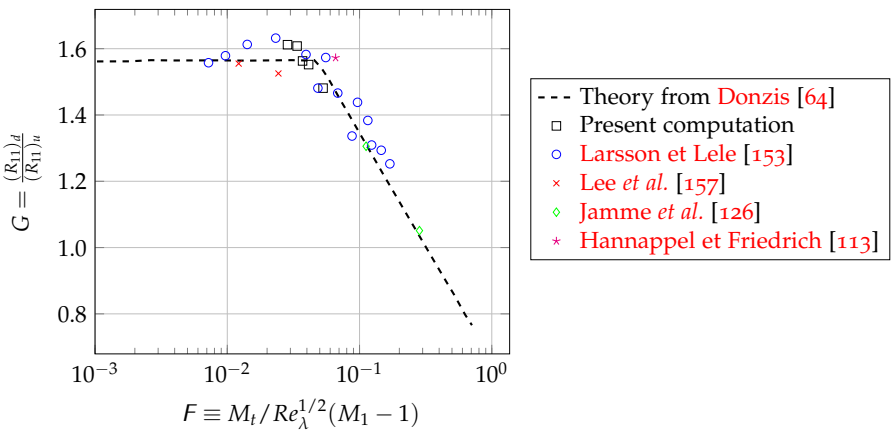


Figure 7.11. *Le facteur d'amplification G en fonction du paramètre adimensionné F. Les données de la littérature sont extraites de Donzis [64].*

Pour déterminer le régime d'interaction et la structure de choc, il est habituel de considérer la valeur de la variance de dilatation normalisée $\Theta = (\overline{\theta^2}/\overline{\theta}^2 - 1)^{1/2}$ où θ est la valeur de la dilatation instantanée à l'abscisse de la discontinuité, c'est-à-dire où la dilatation prend sa plus grande valeur négative. Suivant les travaux de Larsson et Lele [153] et Donzis [63], la valeur de Θ peut être utilisée comme mesure de la structure de choc. Une valeur faible indique un front de choc uniforme et une grande valeur indique un front de choc très "plissé" voire même "cassé". La Figure 7.12 compare les résultats de nos simulations aux données rassemblées par Donzis [64]. Sur la Figure 7.12, nous trouvons également le tracé de la courbe de meilleur ajustement :

$$\Theta = c_1 \frac{M_t}{\Delta M} + c_2 \left(\frac{M_t}{\Delta M} \right)^3, \tag{7.18}$$

avec $c_1 = 0.15$ et $c_2 = 0.115$.

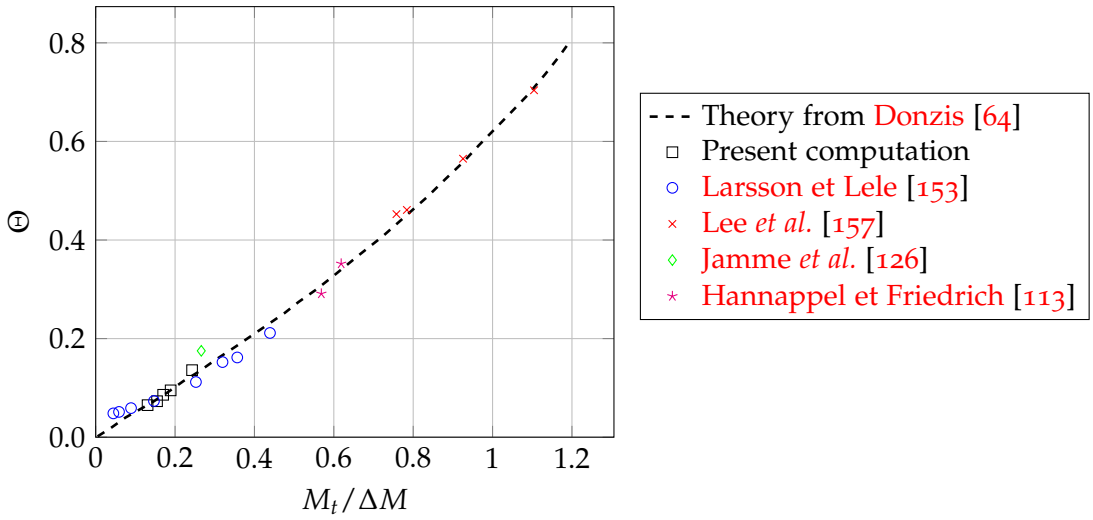


Figure 7.12. *RMS de la dilatation normalisée Θ versus $M_t/(M_1 - 1)$. Les données de la littérature sont extraites de Donzis [64].*

7.3 Évaluation de l'enstrophie

Maintenant que nous avons examiné l'influence de choc normal sur l'écoulement turbulent isotrope, nous poursuivons nos analyses du phénomène d'interaction entre choc normal et turbulence en nous intéressant à l'évolution de la vorticité et de l'enstrophie. La Figure 7.13 présente l'évolution des variances de vorticité normalisées par leurs valeurs à l'amont immédiat du choc $R_{\omega_i} = \overline{\rho\omega_i'^2}/(\overline{\rho\omega_i'^2})_u$.

La composante transverse est amplifiée directement au niveau du choc durant l'interaction en raison de la compression, puis elle subit une décroissance continue. Quant à la composante longitudinale, elle est initialement peu affectée à la traversée du choc, puis elle subit une croissance brutale avant de décroître sous l'effet de la dissipation visqueuse et s'équilibre ensuite avec la composante transversale. L'augmentation du nombre de Mach aval a pour

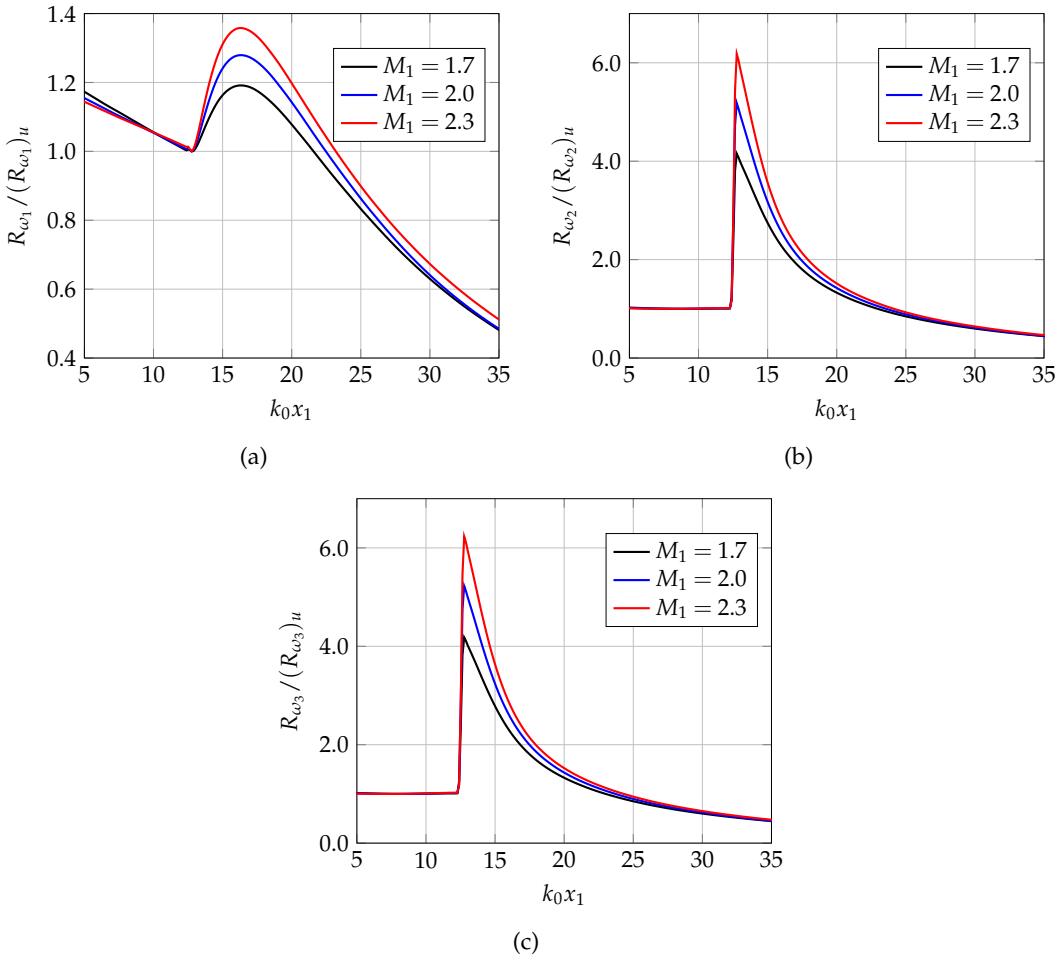


Figure 7.13. *Évolution longitudinale des variances de vorticité normalisées par leurs valeurs à l'amont immédiat du choc.*

effet d'amplifier davantage les deux composantes longitudinale et transversale. Par ailleurs, la Figure 7.14 met en évidence un retour local à l'isotropie pour la vorticité à partir de $k_0x_1 \approx 23$, contrairement aux résultats de simulations de Lee *et al.* [156] et Lee *et al.* [157]. En revanche, nos résultats sont en bon accord avec les travaux plus récents de Larsson *et al.* [152]. Ce qui explique probablement ces différences est la résolution du maillage. En effet, la génération de l'anisotropie de la turbulence pendant l'interaction avec un choc est un processus fortement non linéaire, engendré par les termes de corrélation pression-vitesse et pression-déformation dans les régions situées juste à l'aval du choc, et une résolution insuffisante est donc peut être la cause du non-retour à l'isotropie. De plus, le nombre de Reynolds faible de nos simulations implique une décroissance visqueuse rapide derrière le choc, qui annule tout retour à l'isotropie. Des calculs à grande échelle à des nombres de Reynolds plus élevés sont nécessaires pour éclairer le non retour à l'isotropie de la turbulence.

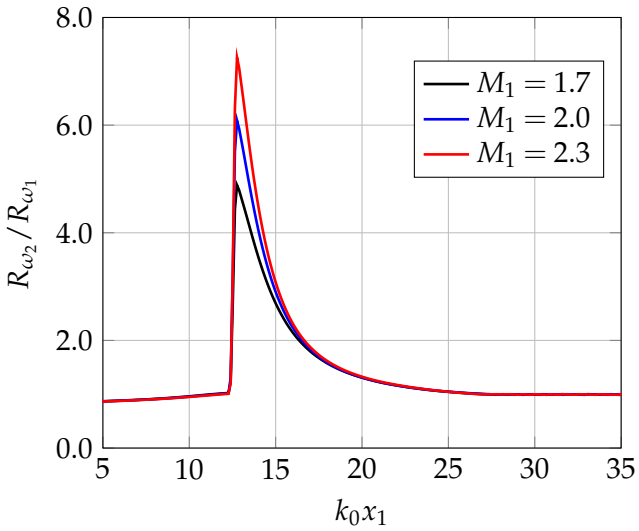


Figure 7.14. *Évolution longitudinale du tenseur d'anisotropie*

7.3.1 Bilan de vorticité

L'équation de transport moyennée de chaque composante de la vorticité $\overline{\omega_i}$ est donnée par :

$$\frac{\mathrm{D}\overline{\omega_i}}{\mathrm{D}t} = \underbrace{\overline{\omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}}_{\mathcal{T}_1} - \underbrace{\overline{\omega_i \frac{\partial u_j}{\partial u_j}}}_{\mathcal{T}_2} + \underbrace{\overline{e_{ijk} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial x_k}}}_{\mathcal{T}_3} + \underbrace{\overline{e_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{km}}{\partial x_m} \right)}}_{\mathcal{T}_4}, \tag{7.19}$$

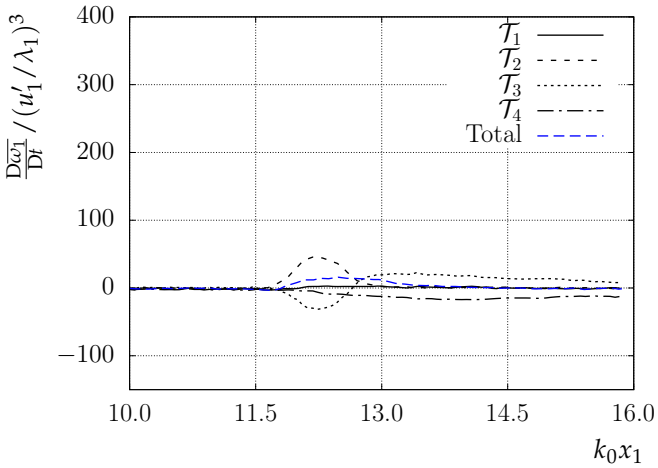
où le symbole de Levi-Civita s'écrit $e_{ijk} = (i-j)(j-k)(k-i)/2$. L'amplification de la vorticité peut être mieux comprise en analysant le bilan de conservation de la vorticité (7.19) terme par terme. Les contributions des termes individuels dans le bilan de vorticité sont tracées à la Figure 7.15. L'amplification des fluctuations transversales est principalement due au terme de compression $\mathcal{T}_2$, avec une contribution négligeable des termes baroclines et d'étirement. Les contributions des termes compressibles et d'étirement s'annulent et se compensent dans le cas des fluctuations longitudinales juste en aval du choc. L'amplification de la vorticité transversale en comparaison avec la vorticité longitudinale est en accord avec les résultats de simulations numériques de Ryu et Livescu (2014) [231] et Mahesh *et al.* (1997) [174].

7.3.2 Interaction entre vorticité et déformation

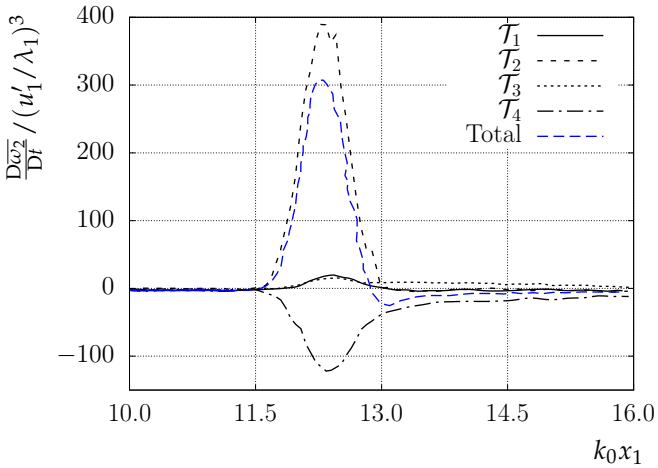
Nous rappelons ici que le gradient de vitesse $\mathcal{A} = \nabla \boldsymbol{u}$ peut se décomposer en deux contributions :

$$\mathcal{A}_{ij} = \mathcal{S}_{ij} + \mathscr{W}_{ij}, \tag{7.20}$$

où l'étirement (tenseur des taux de déformation), $\mathcal{S}_{ij}$, et la partie correspondant à la rotation, $\mathscr{W}_{ij}$, représentent respectivement la partie symétrique et la partie antisymétrique ($\mathcal{S}_{ij} = (\mathcal{A}_{ij} + \mathcal{A}_{ji})/2$ et $\mathscr{W}_{ij} = (\mathcal{A}_{ij} - \mathcal{A}_{ji})/2$). Nous examinons maintenant l'interaction entre la vorticité et la déformation entre l'amont et l'aval du choc. L'évolution de l'enstrophie $\omega = (\omega_i \omega_i)^{1/2}$ où



(a) composante longitudinale



(b) composante transversale

Figure 7.15. *Évolution longitudinale des termes contribuant au bilan de la composante longitudinale (a) et composante transversale de la vorticité (b) pour le cas de référence $M_1 = 1.7$ normalisées par $(u_1'/\lambda_1)^3$*

la vorticité est définie par $\omega_i = -e_{ijk}\mathscr{W}_{ji}$, et celle de $\mathcal{S} = (\mathcal{S}_{ij}\mathcal{S}_{ij})^{1/2}$ obéit à :

$$\frac{1}{2}\frac{D\omega^2}{Dt} = \omega_i\omega_j\mathcal{S}_{ij} - \omega_i\omega_j\mathcal{S}_{kk}\delta_{ij} + \frac{\omega_i\epsilon_{ijk}}{\rho^2}\frac{\partial\rho}{\partial x_j}\frac{\partial p}{\partial x_k} + \omega_i\epsilon_{ijk}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau_{kl}}{\partial x_l}\right), \tag{7.21}$$

$$\frac{1}{2}\frac{D\mathcal{S}^2}{Dt} = -\mathcal{S}_{ik}\mathcal{S}_{kj}\mathcal{S}_{ij} - \frac{1}{4}\omega_i\omega_j\left(\mathcal{S}_{ij} - \mathcal{S}_{kk}\delta_{ij}\right) - \frac{\mathcal{S}_{ij}}{\rho}\frac{\partial^2 P}{\partial x_i\partial x_j} + \frac{\mathcal{S}_{ij}}{2\rho^2}\left(\frac{\partial P}{\partial x_i}\frac{\partial\rho}{\partial x_j} + \frac{\partial\rho}{\partial x_i}\frac{\partial P}{\partial x_j}\right) + \mathcal{S}_{ij}\varrho_{ij}, \tag{7.22}$$

avec

$$\varrho_{ij} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau_{iq}}{\partial x_q}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial\tau_{jq}}{\partial x_q}\right) \tag{7.23}$$

Les quatre termes qui apparaissent à droite de l'égalité de (7.21) décrivent, respectivement, l'étirement tourbillonnaire (production d'enstrophie), l'expansion (ou compression) volumique (dilatation), le couple barocline et la diffusion visqueuse. Dans un écoulement à masse

volumique constante, les termes barocline et de dilatation sont nuls. Ces deux mécanismes distinguent les écoulements à masse volumique constante des écoulements à masse volumique variable. Le terme d'expansion ou dilatation volumique peut devenir important quand la masse volumique diminue suite au dégagement de chaleur au sein de l'écoulement. Comme la divergence de la vitesse $\partial u_j/\partial x_j$ est positive pour un fluide en expansion, le terme $-\omega_i\omega_j\mathcal{S}_{kk}$ représente une diminution de l'enstrophie. Le couple barocline représente la génération (ou la destruction) de la vorticité induite par l'interaction des gradients de masse volumique avec le gradient local de pression.

L'équation d'évolution de $\mathcal{S}$ est plus compliquée. Á partir du terme de droite de (7.22), nous voyons que l'évolution de $\mathcal{S}$ implique une auto-amplification, l'influence d'effets locaux induits par le champ de vorticité $\boldsymbol{\omega}$, les actions locale et non-locale de la pression et de la diffusion visqueuse.

Dans l'équation (7.21), le premier terme de droite est le terme d'étirement de ω_i et force la vorticité à augmenter ou à diminuer par étirement ou compression. Cet effet de la déformation dépend de l'orientation de la vorticité par rapport aux axes principaux de déformation. En effet, le terme de production $\omega_i\omega_j\mathcal{S}_{ij}$ de ω^2 par $\mathcal{S}_{ij}$ dans l'équation (7.21) peut s'écrire :

$$\omega_i\omega_j\mathcal{S}_{ij} = \omega^2\mathcal{S}[\lambda_1(\underbrace{e_{\lambda_1}\cdot\boldsymbol{n}_\omega}_{\cos(\theta_1)})^2 + \lambda_2(\underbrace{e_{\lambda_2}\cdot\boldsymbol{n}_\omega}_{\cos(\theta_2)})^2 + \lambda_3(\underbrace{e_{\lambda_3}\cdot\boldsymbol{n}_\omega}_{\cos(\theta_3)})^2] \tag{7.24}$$

où $\boldsymbol{n}_\omega = \boldsymbol{\omega}/|\boldsymbol{\omega}| = (\omega_1,\omega_2,\omega_3)/|\boldsymbol{\omega}|$ le vecteur normalisé de vorticité, les quantités λ_i, e_{λ_i} représentent respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformation $\mathcal{S}_{ij}$ avec $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$. Dans un écoulement turbulent incompressible, la trace du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$ est nulle c'est-à-dire que la somme les trois valeurs propres est nulle. La valeur λ_1 correspond à la direction principale d'étirement la plus importante tandis que λ_3 est associée à la direction principale de compression la plus importante. La valeur propre intermédiaire est notée λ_2. La variable θ_i correspond à l'angle entre la direction principale e_{λ_i} et la direction normale aux iso-lignes de ω, i.e. $\boldsymbol{n}_\omega$.

Le couplage non-linéaire entre le tenseur des taux de déformation et la vorticité est apparent dans les équations (7.21) - (7.22). De plus, il est évident, d'après l'équation (7.21), que le signe de la contribution associé à l'interaction vorticité/tenseur de déformation dépendra des orientations θ_i et des valeurs propres λ_i associés. Un alignement parfait correspond au cas $e_i \cdot \boldsymbol{n}_\omega = \cos(\theta_i) = 1$, un alignement perpendiculaire entre les deux vecteurs correspond $e_{\lambda_i} \cdot \boldsymbol{n}_\omega = \cos(\theta_i) = 0$ et un anti-alignement se présente quand $e_i\boldsymbol{n}_\omega = \cos(\theta_i) = -1$.

Les valeurs propres λ_i du tenseur des taux de déformation sont très importantes pour l'analyse de la structure locale et de la dynamique des écoulements turbulents. Mentionnons par exemple que la connaissance de la répartition des valeurs propres du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$ est fondamentale car elle affecte directement le mécanisme de vorticité et influence le processus de cascade d'énergie en écoulement turbulents. Si deux des trois valeurs propres de $\mathcal{S}_{ij}$ sont positives (λ_1 et λ_2) et la troisième (λ_3 forcément) négative, alors la cascade énergétique est

reliée à la production naturelle de petites échelles (c'est-à-dire que le flux d'énergie est dévié "*skewed*" dans le sens positif) permettant une croissance de la vorticité alors que si deux sont négatives (λ_2 et λ_3) et la troisième positive (λ_1 forcément), le flux énergétique se fait dans le sens négatif. Pour de plus amples informations sur le role joué par les valeurs propres λ_i du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$, le lecteur pourra se reporter au livre de Tsinober [259].

Les PDFs des valeurs propres du tenseur des taux de déformation λ_i sont reportées sur la Figure 7.16. Les valeurs correspondantes sont normalisées par l'échelle de Kolmogorov, c'est-à-dire $\lambda_i^* = \lambda \eta_K^2 / \nu$, avec ν la viscosité cinématique et η_K l'échelle de longueur Kolmogorov. La répartition de la valeur propre λ_3 est plus large et plate que celles de λ_1. La distribution des valeurs λ_2 présente une asymétrie vers les valeurs positives contrant ainsi la différence de répartition de λ_1 et λ_3 et induisant ainsi un flux de transfert d'énergie positif. La probabilité d'obtenir une valeur positive de λ_2 est en effet bien supérieure à celle d'avoir une valeur négative : plus de 68% des échantillons sont effectivement positifs en amont et en aval du choc. Nous constatons par ailleurs que, bien que la forme des PDFs ne soit pas modifiée de manière significative à la traversée du choc, l'interaction avec l'onde de choc augmente légèrement les variances des distributions, quelle que soit la valeur propre considérée. Betchov (1956) [15] a suggéré que la valeur propre intermédiaire λ_2, qui peut être positive ou négative, détermine la topologie locale de l'écoulement. Lorsque λ_2 est négatif, alors il existe deux directions de compression et le champ d'écoulement tend à posséder une topologie en forme de tubes et lorsque λ_2 est positif, il existe deux directions d'étirement et le champ d'écoulement local possède des structures en forme de nappes.

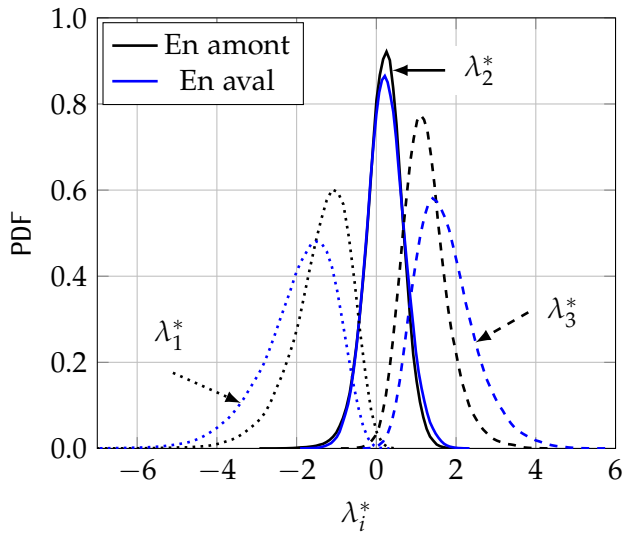


Figure 7.16. *PDF des valeurs propres normalisées du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$ en amont (traits noirs) et aval (traits bleus) du choc pour le cas de références $M_1 = 1.7$*

Il a été montré, dans le cas d'un écoulement turbulent homogène isotrope [6, 119, 196, 197, 260], que :

- les statistiques d'alignement de la vorticité avec les directions principales de déformation ont montré que la vorticité tend à s'aligner avec l'axe de déformation intermédiaire e_{λ_2} ;
- il n'y pas d'orientation préférentielle de ω par rapport à la direction principale d'étire-

ment e_{λ_1} ;

- la vorticité à tendance à s'aligner perpendiculairement avec la direction principale de compression e_{λ_3}. De plus, il a été montré qu'environ un tiers du volume d'un écoulement turbulent est occupé par des régions où la vorticité est comprimée et ainsi ce sont des régions de destruction d'enstrophie [262].

Plusieurs explications ont été données pour expliquer cet alignement. Jiménez [131] suggère que cet alignement est purement cinématique et résulte de l'aspect quasi - bidimensionnel de l'écoulement situé à proximité d'un filament de vorticité. Cet alignement s'accentue dans les régions dominées par la vorticité. Dresselhaus et Tabor [65] suggèrent que cet alignement provient de la rotation des directions de déformation due à la vorticité et aux effets non-locaux induits par la pression plutôt que des effets d'étirement eux-mêmes. En effet, la vorticité a un effet dans la rotation des axes de déformation (terme $\omega_i\omega_j\mathcal{S}_{ij}$ dans l'équation (7.21)). Cet effet réoriente les axes de déformation quand la vorticité n'est pas alignée avec ceux-ci. La rétroaction de la vorticité sur la déformation entraîne alors la rotation des axes de déformation et l'alignement de la vorticité avec e_{λ_2}. Ce serait donc la rétro-action de la vorticité sur la déformation par le biais de la rotation des axes de déformation qui serait responsable de l'alignement avec e_{λ_2}. Les différents éléments de la dynamique nous permettent de présenter le scénario probable de l'alignement de la vorticité avec e_{λ_2} en dynamique locale Nomura et Post [197] : si la vorticité n'est pas alignée dés le départ avec un axe de déformation, la composante sur e_{λ_1} commence par s'amplifier par *vortex stretching*. Quand elle devient suffisamment importante, elle induit une rotation des axes de déformation qui transfère cette composante sur celles de e_{λ_2} et e_{λ_3}. Comme l'étirement sur la composante reliée à e_{λ_3} a pour effet de diminuer cette composante ($\lambda_3 < 0$), c'est la deuxième composante qui va s'amplifier ($\lambda_2 > 0$) et la vorticité va s'aligner avec e_{λ_2}. Guala *et al.* [105] montrent que la viscosité contribue très significativement à cet alignement de la vorticité.

Nous représentons dans la Figure 7.17 la densité de probabilité du cosinus de l'angle θ_i entre la vorticité ω et les vecteurs propres de la déformation e_i obtenue en amont et en aval du choc. Nous constatons qu'en amont du choc où nous avons un écoulement turbulent homogène isotrope, comme nous nous y attendons, la probabilité est piquée lorsque le cosinus de l'angle entre vorticité et le vecteur propre intermédiaire e_{λ_2} s'approche de 1 : c'est l'alignement préférentiel de la vorticité avec le vecteur propre intermédiaire. Remarquons aussi que l'orientation de la vorticité et de celle du vecteur e_{λ_3} associé à la plus grande des valeurs propres sont quasi-indépendantes (la densité est relativement plate). Enfin, nous constatons que typiquement, la vorticité est préférentiellement orthogonale à e_{λ_3}.

En aval du choc, nous remarquons, d'après la Figure 7.17, l'amplification significative de l'alignement préférentiel de la vorticité avec la direction intermédiaire e_{λ_2}, ce qui indique une amélioration du mécanisme d'étirement tourbillonnaire "*vortex-stretching*" et influence également le processus de cascade d'énergie de l'écoulement turbulent. Ainsi, à la traversé du choc, la turbulence n'est plus une turbulence isotrope tridimensionnelle, mais tend à être localement axisymétrique. De plus, l'amplification de la vorticité avec e_{λ_1} est d'autant plus

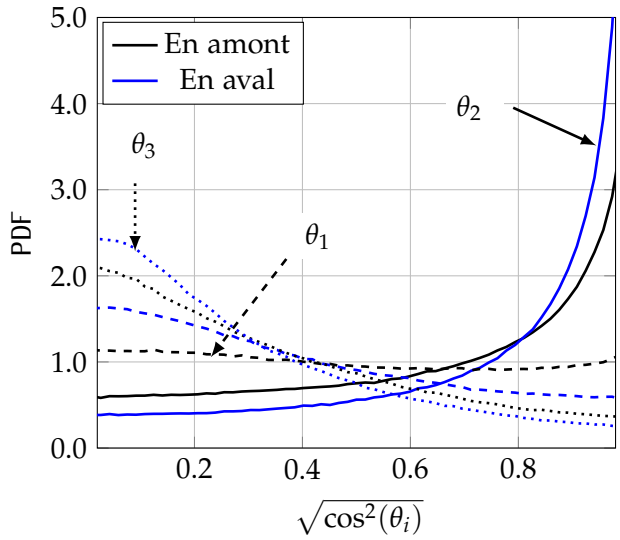


Figure 7.17. *PDF du cosinus de l'angle entre le vecteur de vorticité normalisé n_ω et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations $\mathcal{S}_{ij}$ en amont (traits noirs) et en aval (traits bleus) pour le cas de références $M_1 = 1.7$.*

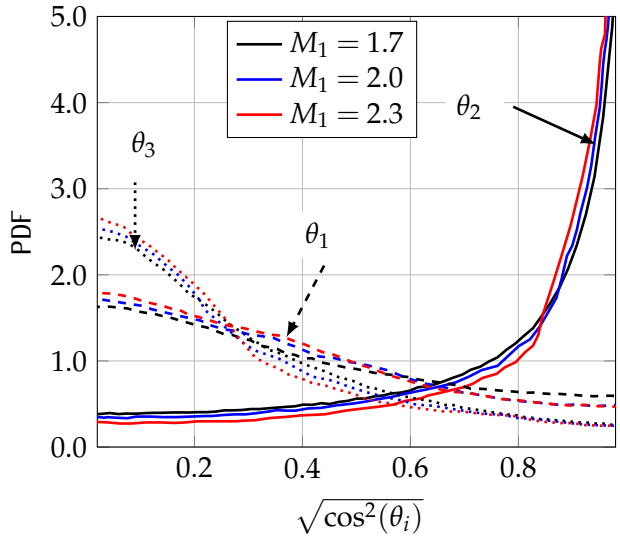


Figure 7.18. *Comparaison entre les PDFs du cosinus de l'angle entre le vecteur de vorticité normalisé n_ω et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations $\mathcal{S}_{ij}$ en amont du choc pour les trois Mach $M_1 = 1.7$, 2.0 et 2.3.*

grande que le Mach en amont est grand, et la vorticité à tendance à s'aligner légèrement perpendiculairement avec les deux vecteurs propres e_{λ_1} et e_{λ_3} cela d'autant plus que M_1 croît, comme l'indique la Figure 7.18. Cette analyse rejoint celle que nous avons préalablement faite en commentant la Figure 7.10.

En aval de l'onde de choc, la vorticité et le vecteur principal e_{λ_2} tendent à s'aligner parallèlement à la surface de choc, comme le montre la Figure 7.19, qui présente l'orientation entre le vecteur unitaire normal à la surface du choc $n_{x_1} = e_1 / \sqrt{e_i \cdot e_i}$ et ces deux vecteurs ω et e_{λ_2}. Dans la même figure, on présente l'orientation du vecteur d'étirement de vorticité $\mathscr{W}_i = \omega_j \mathcal{S}_{ij}$, représentant le terme de production d'enstrophie dans l'équation (7.21) et défini par :

$$\omega_i \mathscr{W}_i = \omega_i \omega_j \mathcal{S}_{ij} = \vartheta \omega^2, \tag{7.25}$$

où $\vartheta = \mathcal{S}[\lambda_1 \cos(\theta_1) + \lambda_2 \cos(\theta_2) + \lambda_3 \cos(\theta_3)]$ le taux de production d'enstrophie. L'alignement des trois vecteurs ω, e_{λ_2} et $\mathscr{W}$ avec le vecteur longitudinal unitaire n_{x_1} est en bon accord avec les processus d'étirement et de transfert d'énergie du vortex. Un tel comportement a été

observé dans une large gamme d'écoulements turbulents, voir par exemple Ashurst *et al.* [6], Tsinober *et al.* [261] et Vincent et Meneguzzi [270]. La comparaison entre les données obtenues en amont et en aval de l'onde de choc confirme cette tendance ainsi que l'augmentation associée de l'activité turbulente.

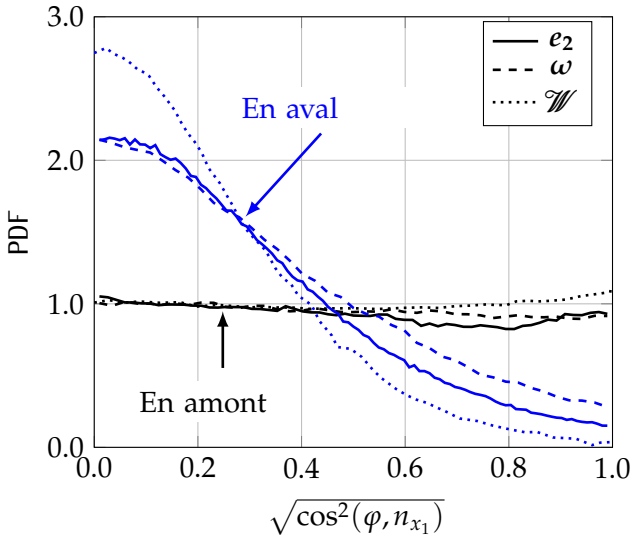


Figure 7.19. *PDF du cosinus de l'angle entre le vecteur longitudinal n_{x_1} et le vecteur vorticité , le vecteur intermédiaire e_{λ_2} et le vecteur étirement de vorticité $\mathscr{W}$ en amont (traits noirs) et en aval (traits bleus) du choc pour le cas de références $M_1 = 1.7$.*

7.3.3 Angle entre enstrophie et déformation

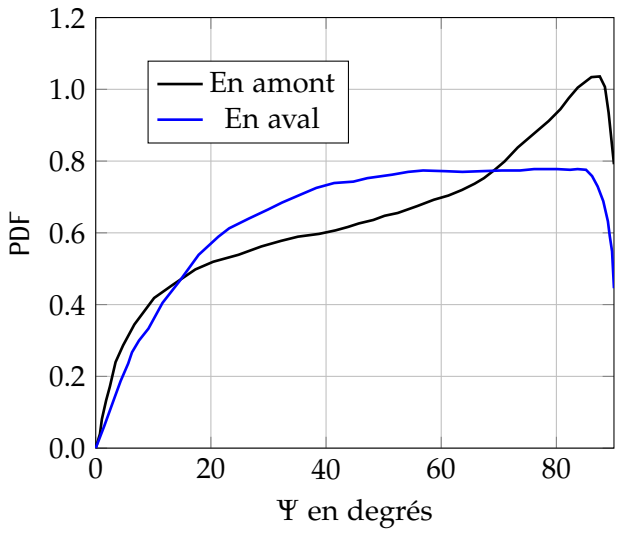
Nous définissons l'angle Ψ entre Enstrophie et le taux de déformation par [23] :

$$\Psi = \arctan\left(\frac{\mathcal{S}_{ij}\mathcal{S}_{ij}}{\mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{ij}}\right) \tag{7.26}$$

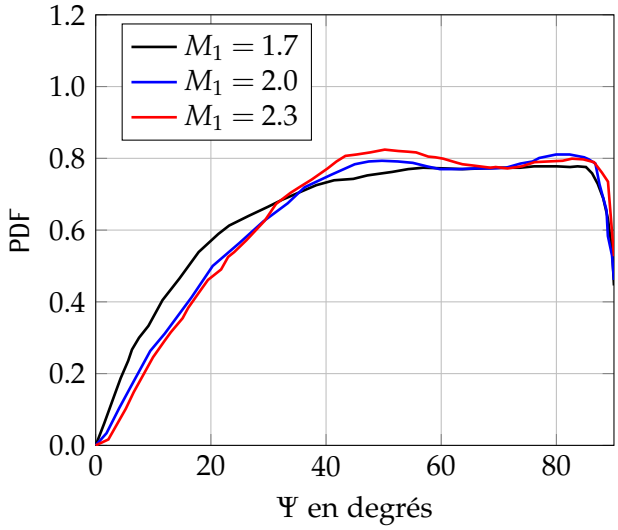
En fonction de l'intensité du taux de déformation et de l'enstrophie, la définition de Ψ dans (7.26) permet de classifier l'écoulement turbulent en deux régions :

- les grandes valeurs de Ψ ($\Psi \gg 45°$) correspondent aux régions dominées par les déformations ;
- les petites valeurs de Ψ ($\Psi \ll 45°$) correspondent aux régions dominées par la vorticité ;

Les régions pour lesquelles $\Psi \sim 45°$ présentent la plus grande corrélation entre la contribution de vorticité et de déformations. La Figure 7.20 présente la PDF de Ψ obtenue en amont et en aval du choc. La Figure 7.20(a) montre qu'en amont du choc la PDF présente un pic dans les grandes valeurs, ce qui signifie qu'en turbulence homogène isotrope les déformations dominent la vorticité. Ceci est consistant avec les résultats numériques de Jaberi *et al.* (2000) [125] et Boratav *et al.* (1998) [23]. Á la traversée du choc (Figure 7.20(b)), nous remarquons que la PDF se symétrise d'autant plus que M_1 augmente en présentant un maximum au niveau de 45°. Les extrémités de la PDF restent néanmoins asymétriques et indiquent prédominance des déformations sur la vorticité dans certaines régions.



(a)



(b)

Figure 7.20. *PDF de l'angle entre l'enstrophie et le tenseur des taux de déformation en amont et en aval du choc pour le cas de référence $M_1 = 1.7$ (b). Comparaison entre les différents Mach en aval du choc (b).*

7.3.4 Production d'enstrophie

Il est généralement admis que le taux moyen de production d'enstrophie est positif du fait de la prédominance de l'étirement sur la compression. La Figure 7.21 présente la PDF de la production d'enstrophie, associée aux effets d'étirement tourbillonnaire, normalisée par $(\nu\eta_K^2)^3$. En amont et en aval du choc, nous remarquons qu'il y a un pic proche de 0 et que la forme de la PDF n'est pas symétrique avec une déviation vers les valeurs positives confirmant une production d'enstrophie par étirement du vortex plus que par compression du vortex [38].

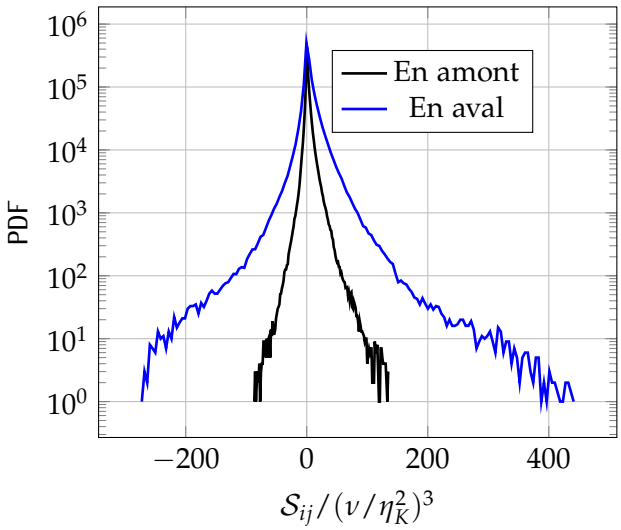


Figure 7.21. *PDF normée (échelle semi−log) de production d'enstrophie normalisée pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

7.4 Structure locale de la turbulence

Nous complétons la description du comportement et de la dynamique de l'étirement et de la vorticité par une caractérisation statistique du type de structure présent dans l'écoulement en amont et en aval du choc. Nous utilisons l'approche proposée par Chong *et al.* [51]. Le principe de cette approche est de classifier la structuration locale de l'écoulement en terme d'invariants du gradient de vitesse. Cette méthode utilise le concept des points critiques du tenseur $\mathcal{A}$ et permet de synthétiser les propriétés morphologiques de l'écoulement à l'aide du tracé de la fonction de densité de probabilité conjointe des invariants du tenseur $\mathcal{A}$. Pour une revue plus complète de cette approche, le lecteur peut se référer aux travaux de Chong *et al.* (1990) [51], Soria *et al.* (1994) [244] et Perry et Chong (1994) [205].

Nous rappelons brièvement dans ce qui suit les paramètres de cette représentation topologique en suivant les travaux de Pirozzoli et Grasso [214] et Perry et Chong [205]. Les valeurs propres Σ du tenseur de gradient de vitesse $\mathcal{A}$ qui sont solutions de l'équation $\det(\mathcal{A} - \Sigma I) = 0$ s'expriment par :

$$\Sigma^3 + P_{\mathcal{A}}\Sigma^2 + Q_{\mathcal{A}}\Sigma + R_{\mathcal{A}} = 0, \tag{7.27}$$

où $P_{\mathcal{A}}$, $Q_{\mathcal{A}}$ et $R_{\mathcal{A}}$ désignent le premier, deuxième et troisième invariant de $\mathcal{A}$, définis par :

$$\begin{cases} P_{\mathcal{A}} = -\mathcal{S}_{ij} & = -(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3), \quad (7.28a) \\ Q_{\mathcal{A}} = \frac{1}{2}\left(P_{\mathcal{A}}^2 - \mathcal{S}_{ij}\mathcal{S}_{ij} + \mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{ij}\right) & = \sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1, \quad (7.28b) \\ R_{\mathcal{A}} = \frac{1}{3}\left(-P_{\mathcal{A}}^3 + 3P_{\mathcal{A}}Q_{\mathcal{A}} - \mathcal{S}_{ij}\mathcal{S}_{jk}\mathcal{S}_{ki} - 3\mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{jk}\mathcal{S}_{ki}\right) & = -\sigma_1\sigma_2\sigma_3, \quad (7.28c) \end{cases}$$

où σ_1, σ_2 et σ_3 sont les valeurs propres de $\mathcal{A}$. Les propriétés topologiques du gradient de vitesse sont fonctions de la position dans l'espace des invariants $(P_{\mathcal{A}}, Q_{\mathcal{A}}, R_{\mathcal{A}})$. Selon la classification de Chong *et al.* (1990) [51], les structures turbulentes déterminant la topologie locale de

l'écoulement en chaque point de l'écoulement sont de type focales ou non-focales en fonction de la valeur du discriminant du tenseur $\mathcal{A}$ qui s'écrit :

$$\Delta_{\mathcal{A}} = \frac{27}{4} R_{\mathcal{A}}^2 + \left(P_{\mathcal{A}}^3 - \frac{9}{2} P_{\mathcal{A}} Q_{\mathcal{A}} \right) R_{\mathcal{A}} + \left(Q_{\mathcal{A}}^3 - \frac{1}{4} P_{\mathcal{A}}^2 Q_{\mathcal{A}}^2 \right). \tag{7.29}$$

Les valeurs de $\Delta_{\mathcal{A}}$ détermine la nature des valeurs propres de $\mathcal{A}$. Si $\Delta_{\mathcal{A}} > 0$, nous avons une valeur propre réelle et deux valeurs propres complexes conjuguées correspondant à des régions focales ; si $\Delta_{\mathcal{A}} < 0$, les trois valeurs propres sont réelles et distinctes impliquant la présence de régions non-focales.

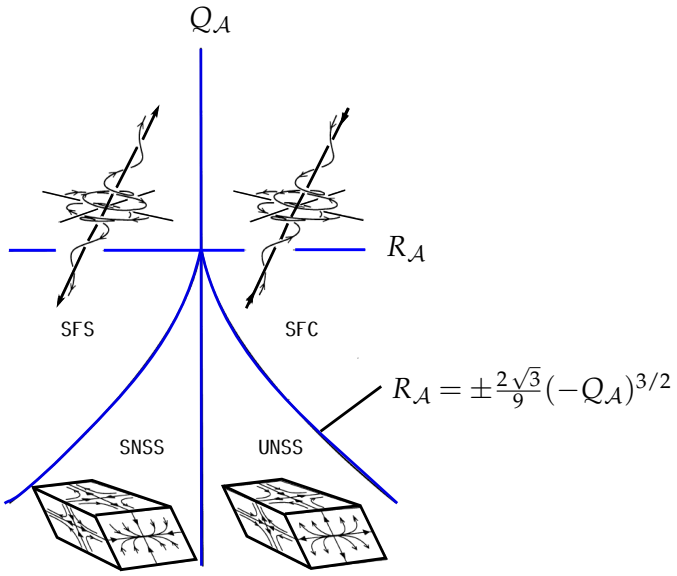


Figure 7.22. *Illustration et terminologie des topologies locales de l'écoulement en fonction des invariants $Q_{\mathcal{A}}$ et $R_{\mathcal{A}}$. D'après Ooi et al. (1999) [200].*

Pour des écoulements incompressibles, le premier invariant $P_{\mathcal{A}}$ est nul puisque l'écoulement est à divergence nulle, la topologie locale de l'écoulement est uniquement représentée par un point dans le plan des invariants $(Q_{\mathcal{A}} - R_{\mathcal{A}})$. La Figure 7.22 présente les différentes topologies dans le plan $(Q_{\mathcal{A}} - R_{\mathcal{A}})$ ainsi que la courbe à l'allure de "tente" qui représente les solutions de l'équation :

$$\Delta_{\mathcal{A}} = \frac{27}{4} R_{\mathcal{A}}^2 + Q_{\mathcal{A}}^3. \tag{7.30}$$

Les régions de l'écoulement dominées par les déformations (régions non-focales) ont des valeurs des invariants $Q_{\mathcal{A}}$ et $R_{\mathcal{A}}$ qui se situent en dessous de cette courbe ; les régions de l'écoulement dominées par la vorticité (régions focales) ont des valeurs des invariants $R_{\mathcal{A}} > 0$ et $R_{\mathcal{A}}$ qui se situent au-dessus de la courbe [200]. En résumé, la vorticité ou les déformations dominent lorsque, respectivement, $Q_{\mathcal{A}} > 0$ ou $Q_{\mathcal{A}} < 0$. Lorsque $R_{\mathcal{A}} > 0$, la topologie locale de l'écoulement est caractérisée par une compression et deux dilatations. Lorsque $R_{\mathcal{A}} < 0$, la topologie locale de l'écoulement est caractérisée par deux compressions et une dilatation. Dans la terminologie de Chong *et al.* [51], les topologies locales des régions dominées par les déformations sont soit nœud-stable/selle/selle (SNSS, $\Delta_{\mathcal{A}} < 0$ et $R_{\mathcal{A}} < 0$) soit nœud-instable/selle/selle (UNSS, $\Delta_{\mathcal{A}} < 0$ et $R_{\mathcal{A}} > 0$) et correspondent respectivement aux zones

de compression plane avec dilatation axiale et zones de dilatation plane avec compression axiale. Les régions dominées par la vorticité ont soit une topologie focale-stable/étiré (SFS, $\Delta_{\mathcal{A}} > 0$ et $R_{\mathcal{A}} < 0$) soit focale-instable/comprimé SFC, $\Delta_{\mathcal{A}} > 0$ et $R_{\mathcal{A}} > 0$) et correspondent respectivement aux vortex étirés et vortex comprimés [1]. Les formes du champ local de l'écoulement correspondant à ces différentes topologies sont indiquées sur la Figure 7.22.

Dans la situation où la compressibilité n'est pas négligeable, Pirozzoli et Grasso (2004) [214] proposent d'utiliser les invariants de la partie déviatrice du tenseur du gradient de vitesse $\mathcal{A}^* = \mathcal{A} - \frac{1}{3}\mathrm{Tr}(\mathcal{A})I$. Les invariants se réécrivent dans ce cas :

$$\begin{cases} Q^*_{\mathcal{A}^*} = \frac{1}{2}\left(\mathcal{S}^*_{ij}\mathcal{S}^*_{ij} + \mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{ij}\right) = Q_{\mathcal{A}} - \frac{1}{3}P^2_{\mathcal{A}} = \sigma^*_1\sigma^*_2 + \sigma^*_2\sigma^*_3 + \sigma^*_3\sigma^*_1, & (7.31a) \\ R^*_{\mathcal{A}^*} = \frac{1}{3}\left(\mathcal{S}^*_{ij}\mathcal{S}^*_{jk}\mathcal{S}^*_{ki} * + 3\mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{jk}\mathcal{S}_{ki}\right) = \mathcal{R}_{\mathcal{A}} - \frac{1}{3}P_{\mathcal{A}^*}Q_{\mathcal{A}} + \frac{2}{27}P^3_{\mathcal{A}} = -\sigma^*_1\sigma^*_2\sigma^*_3, & (7.31b) \end{cases}$$

avec σ^*_1, σ^*_2 et σ^*_3 les valeurs propres de $\mathcal{A}^*$.

Sur la Figure 7.23, la PDF conjointe de $(Q^*_{\mathcal{A}^*}, R^*_{\mathcal{A}^*})$ normalisées par la valeur moyenne du deuxième invariant du tenseur de rotation $\overline{Q_{\mathscr{W}}} = \overline{\mathscr{W}_{ij}\mathscr{W}_{ij}}/2$ est tracée pour le cas de référence $M_1 = 1.7$. En amont du choc, la PDF conjointe en forme de larme inversée "*teardrop*" sur la Figure 7.23(a) est une caractéristique universelle [71, 214, 180] de la turbulence homogène isotrope, mais aussi des écoulements de couche de mélange et les couches limites [214, 272]. Cette caractéristique se manifeste par une plus grande probabilité dans le deuxième quadrant SFS et le quatrième quadrant UNSS. Néanmoins, des changements significatifs de la dynamique et de la topologie d'écoulements se produisent à travers l'onde de choc (cf. Figure 7.23(b)). En effet, on constate une symétrisation de la forme de la PDF conjointe s'accompagnant d'une renforcement du premier quadrant SFC et du troisième quadrant SNSS, comme l'indique le Tableau 7.2. Ce changement de morphologie des structures turbulentes a également été observé dans les régions fortement détendues en turbulence homogène isotrope forçée par Wang *et al.* [272].

Topolgie	SFS	SFC	UNSS	SNSS
Amont du choc	42.8	25.9	25.2	06.1
Aval du choc	33.5	32.3	17.3	16.9

Tableau 7.2 *– Pourcentage de chaque type de topologie dans la PDF conjointe de $(Q^*_{\mathcal{A}^*}, R^*_{\mathcal{A}^*})$ en amont et en aval du choc pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

Pour examiner davantage ce résultat, on s'intéresse à la mesure de la partie déviatorique

1. Il convient de souligner ici qu'il existe d'autres classifications. Par exemple, Kevlahan *et al.* (1992) [143] introduisent une classification des structures turbulentes basée sur les valeurs $\mathcal{S}^{*2} = \mathcal{S}^{*2}_{ij}\mathcal{S}^{*2}_{ij}$ et de $\mathscr{W}^2 = \mathscr{W}^2_{ij}\mathscr{W}^2_{ij}$, avec $\mathcal{S}^*_{ij} = \mathcal{S}_{ij} - \frac{1}{3}\mathcal{S}_{kk}\delta_{ij}$ la partie déviatorique du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$. Selon les valeurs locales de $\mathcal{S}^*$ et $\mathscr{W}$, ils distinguent trois régions :
   - Si $\mathscr{W}^2 > 2\mathcal{S}^{*2}$, la région est de type "vortex" ;
   - Si $\mathscr{W}^2 < \frac{1}{2}\mathcal{S}^{*2}$, la région est de type "convergentes/divergentes" ;
   - Si $\frac{1}{2}\mathcal{S}^{*2} \leq \mathscr{W}^2 < 2\mathcal{S}^{*2}$, la région est de type cisaillée.

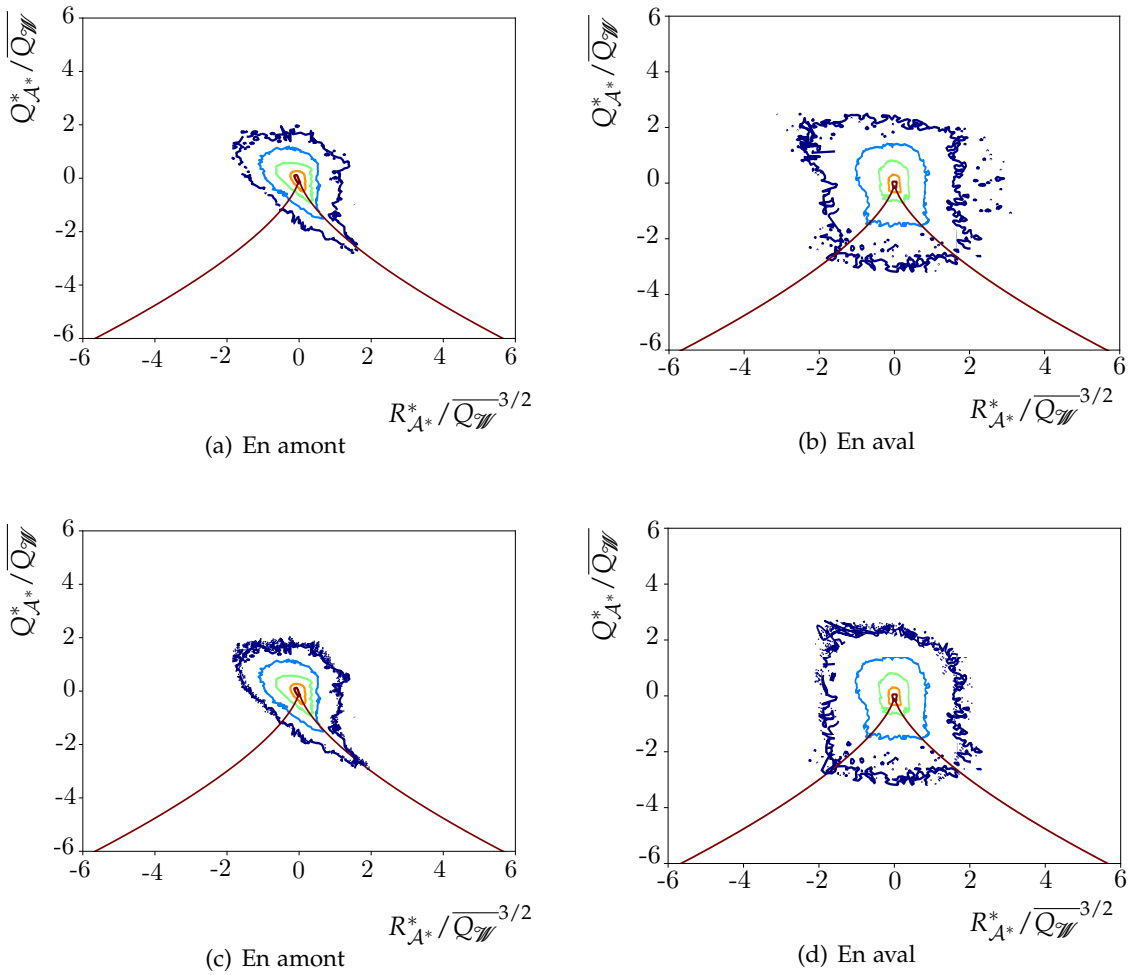


Figure 7.23. *PDF conjointe de* $(Q^*_{\mathcal{A}^*}, R^*_{\mathcal{A}^*})$ *en amont et en aval du choc pour le cas* $M_1 = 1.7$ *(haut) et* $M_1 = 2.0$ *(bas).*

du tenseur de déformation $\mathcal{S}^*_{ij}$ à l'aide du paramètre proposé par Lund et Rogers [172] :

$$s^* = \frac{-3\sqrt{6}\widetilde{\lambda}_1\widetilde{\lambda}_2\widetilde{\lambda}_3}{\left(\widetilde{\lambda}_1^2 + \widetilde{\lambda}_2^2 + \widetilde{\lambda}_3^2\right)^{3/2}} = \frac{9\sqrt{6}R^*_{\mathcal{S}^*}}{\left(-2Q^*_{\mathcal{S}^*}\right)^{3/2}} \tag{7.32}$$

où $Q^*_{\mathcal{S}^*}$ et $R^*_{\mathcal{S}^*}$ représentent le deuxième et troisième invariants du tenseur $\mathcal{S}^*_{ij}$. Sur la Figure 7.24, la PDF de s^* est tracée pour le cas M_1 et M_2 en amont et en aval du choc. Dans la zone pré-choc, la PDF pointe vers le valeurs $s^* \approx 1$, ce qui suppose un état axisymétrique compatible avec la structuration locale de la turbulence en amont du choc. L'allure générale est cependant différente en aval du choc où la PDF prend une forme quasi-symétrique et plate indiquant le caractère symétrisant de l'onde de choc sur les propriétés morphologiques de l'écoulement.

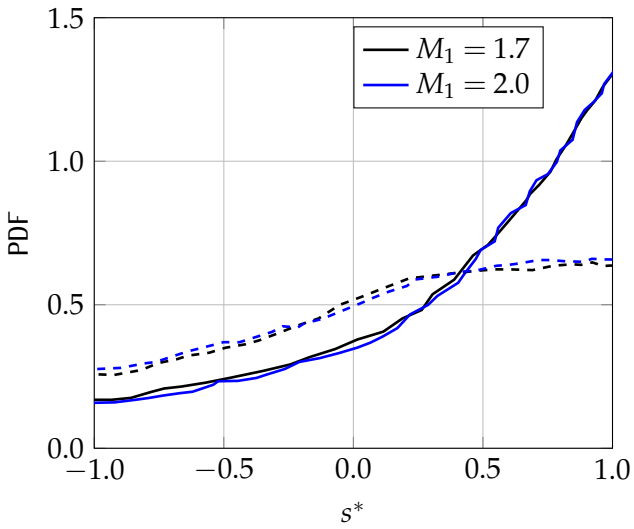


Figure 7.24. *PDF de s^* pour le cas $M_1 = 1.7$ et 2.0.*

7.5 Évolution des échelles de longueur

Nous nous intéressons à l'évolution des échelles de longueur de l'écoulement turbulent à la traversée de l'onde de choc. La première échelle analysée est celle de Kolmogorov η_K qui caractérise, nous le rappelons, les plus petites structures de mouvement d'agitation et est associée au processus de dissipation d'énergie. En amont du choc, la valeur de η_K est relativement stable et vaut $k_0\eta_K \approx 0.0678$, 0.0679 et 0.0679 pour $M_1 = 1.7$, 2.0 et 2.3 respectivement. En aval du choc, et comme l'indique la Figure 7.25, l'échelle de Kolmogorov η_K décroît au voisinage immédiat du choc avant de croître continûment. La partie du domaine hors équilibre (anisotropie), l'expression avec laquelle nous calculons η_K n'est pas correcte, on ne peut dans ce cas interpréter le comportement de cette échelle dans cette zone. Néanmoins, l'effet de décroissance de η_K en amont du choc est bien avéré et ce d'autant plus que le Mach en amont est grand.

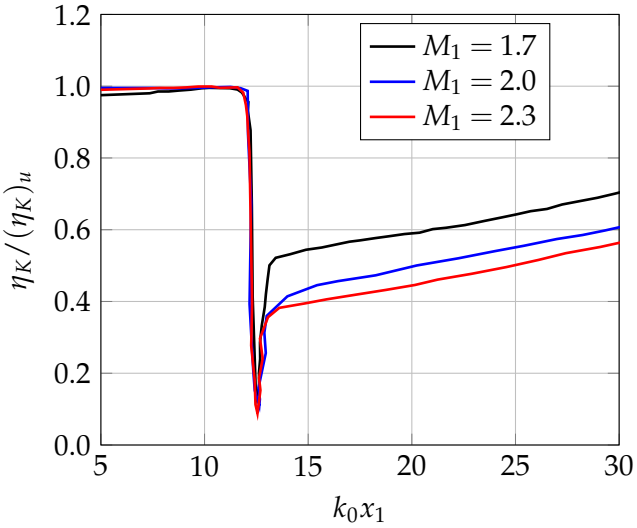


Figure 7.25. *Évolution longitudinale de l'échelle de Kolmogorov η_K.*

La deuxième échelle étudiée est la micro-échelle de Taylor définie suivant chaque direction

d'écoulement par :

$$\lambda_i = \sqrt{\frac{\overline{u_i'^2}}{\overline{\left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_i}\right)^2}}}. \tag{7.33}$$

L'évolution de λ_i en amont de choc est très limitée pour les trois intensités de choc : les valeurs sont $k_0\lambda_i = 0.849$, 0.849 et 0.850 pour $M_1 = 1.7$, 2.0 et 2.3 respectivement.

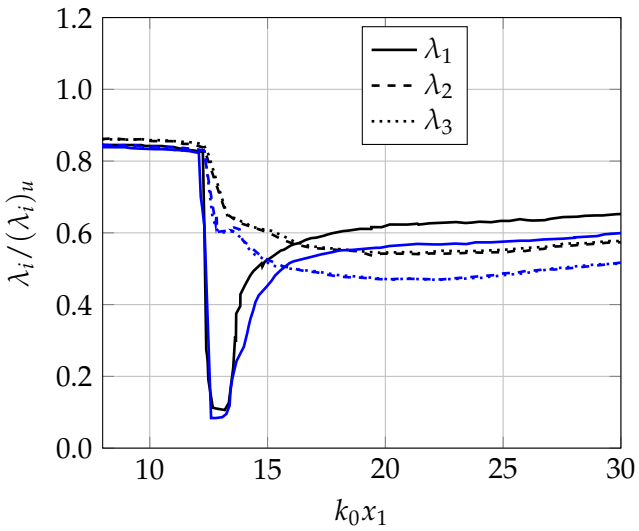


Figure 7.26. *Évolution longitudinale des micro-échelles de Taylor λ_i, $i = 1,2,3$. En noir le cas de référence $M_1 = 1.7$ et en bleu le cas $M_1 = 2.0$*

La Figure 7.26 reporte les résultats obtenus pour les micro-échelles de Taylor dans notre étude où nous nous sommes contentés de présenter les deux cas $M_1 = 1.7$ et $M_2 = 2.0$. On constante que la composante longitudinale λ_1 présente un profil similaire à celui de η_K (cf. Figure 7.26). Ce résultat est en accord avec les travaux de Larsson *et al.* [152]. Néanmoins, le profil des deux composantes transverses est plus problématique et contre-intuitif (le choc peut être considéré comme une compression monodimensionnelle, dans ce cas on s'attend que λ_1 se réduise plus considérablement que λ_2). En effet, Cette échelle a fait l'objet d'un long débat dans la littérature. Entre la théorie LIA qui prédit qu'en aval du choc $\lambda_1 < \lambda_2$ et les résultats de la simulations numériques de Lee *et al.* [156], Lee *et al.* [157] et Jamme *et al.* [127] où il n'y a pas un tranchant sur lequel des deux longueurs λ_1 et λ_2 est le plus prépondérant à la traversée du choc du fait que leurs résultats étaient variés, i.e. dans certaines simulations λ_1 a été trouvé plus grand que λ_2 et dans d'autres études l'opposé a été trouvé. Comme le montrent nos résultats et contrairement à la théorie LIA, les longueurs longitudinales de Taylor deviennent rapidement plus grandes que les longueurs transverses $\lambda_1 > \lambda_2$ pour tous les cas simulés. Néanmoins, ce résultat peut s'expliquer comme suit. Comme le montre la Figure 7.14, les composantes de la vorticité deviennent rapidement isotropes à partir de $k_0x_1 \approx 23$, ceci implique que le gradient de vitesse lui aussi devient isotrope à partir de la même position et que le dénominateur de la longueur longitudinale et transverse de Taylor sont identiques. La Figure 7.9 démontre le non-retour à l'isotropie en aval du choc, et il en résulte que $\lambda_1 > \lambda_2$. La disparité des résultats précédents s'explique premièrement par une résolution de maillage insuffisante, et deuxièmement par l'incapacité de la théorie LIA à prédire les effets non-linéaires ayant lieu à la traversée du choc.

Récapitulatif

Une base de données DNS a été développée et étudiée pour analyser les effets d'interaction entre une onde de choc stationnaire normale et la dynamique d'un champ turbulent. Cette base de données comprend trois intensités de choc, i.e. trois valeurs de Mach ($M_1 = 1.7$, 2.0 et 2.3). Le choix de ces valeurs de nombre de Mach est particulièrement important car, en termes d'amplification des fluctuations de vitesse, il correspond à la zone de transition récemment mise en évidence par Donzis (2012) [64]. Les caractéristiques de turbulence post-choc sont d'abord analysées en détail. L'analyse correspondante concerne certaines propriétés élémentaires, telles que les facteurs d'amplification, et concerne également l'anisotropie de turbulence, qui est évaluée à partir des invariants du tenseur d'anisotropie de contrainte normalisée (*Traceless*) de Reynolds. L'étude de la turbulence post-choc se termine par une étude détaillée de la vorticité, du vecteur d'étirement et des directions principales du tenseur $\mathcal{S}_{ij}$.

8

Interaction choc-scalaire passif

Mini-sommaire

8.1 Description des configurations étudiées **147**
8.2 Phénoménologie du mélange scalaire passif en présence de choc **148**
8.3 Gradient instantané du scalaire et dissipation scalaire **149**
8.3.1 Champ scalaire : mélange turbulent 154
8.3.2 Interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire 157
8.4 Similitudes entre le vecteur de vorticité et le gradient scalaire **164**
8.5 Effets des statistiques de λ_2 sur le champ scalaire **166**
8.6 Intermittence du champ scalaire **167**

Nous poursuivons l'analyse du chapitre précédent en nous intéressant maintenant au mélange scalaire dans la même configuration. Nous allons effectuer une analyse comparative entre le cas obtenu en présence de choc et celui obtenu en absence du choc. Nous mettrons en évidence les effets du choc normal sur le processus du mélange scalaire en nous intéressant aux propriétés du gradient scalaire en écoulement turbulent. Nous détaillons les principaux résultats établis sur la structure du champ scalaire en turbulence et nous poursuivons l'analyse en examinant le comportement local du gradient du scalaire.

8.1 Description des configurations étudiées

Les nombres de Mach convectifs $M_1 = 1.7$, 2.0 et 2.3 retenus pour la simulations choc-turbulences du chapitre précédents sont réutilisés pour le problème d'interaction choc-scalaire étudié dans ce chapitre. Les paramètres de simulations (6.4 et 7.1) restent inchangés. Afin de générer un champ scalaire turbulent, nous allons utiliser une méthode proposée par Reveillon [224]. Elle permet d'imposer n'importe quelle forme de PDF sur le champ scalaire. Sa mise en œuvre est facilitée lorsque la fonction de distribution associée à la PDF peut être inversée analytiquement. C'est le cas avec les PDFs présumées de type "rectangle" [25] que

nous retenons pour générer le champ scalaire turbulent initial (cf. annexe F). L'initialisation des autres variables, les critères de stabilité numérique, ainsi que les conditions aux limites sont similaires à ceux déjà utilisés dans le chapitre précédent. Afin de visualiser l'effet du choc normal sur le champ du scalaire, nous effectuons également trois simulations dans des conditions similaires sans choc, ce qui revient à simuler la décroissance spatiale du champ scalaire. Toutes les simulations ont été conduites sur le supercalculateur *Thor* de l'Institut Pprime. [1] Pour les trois valeurs de Mach convectif avec et sans l'onde de choc normale, les simulations ont été conduites avec 600 processeurs `MPI`. Le coût de calcul total associé aux 6 simulations est d'environ 3.6 millions d'heures `CPU`.

8.2 Phénoménologie du mélange scalaire passif en présence de choc

Dans cette section, nous nous appuyons sur la présentation réalisée par Garcia (2006) [90] dans sa thèse de doctorat. Nous désignons par ξ un scalaire passif. Celui-ci est susceptible de représenter par exemple une concentration d'une espèce chimique ou des variations (modérées) de température. Pour étudier le comportement de ces quantités, nous nous ramenons à la résolution d'une équation de transport d'un unique scalaire passif ξ dont l'évolution est donnée par l'équation d'advection-diffusion suivante [2] :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \xi) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}\right), \tag{8.1}$$

où D est la diffusivité moléculaire du scalaire ξ supposée constante et égale à la diffusivité thermique, ce qui revient à supposer que ξ est advecté avec un nombre de Lewis unitaire. Les effets de Lewis et ceux associés à la diffusion différentielle ne sont donc pas pris en compte dans ce travail. L'équation de transport du champ scalaire (8.1) est linéaire, et donc, a priori, simple à étudier. En réalité, le terme convectif donne à l'équation une grande richesse, aussi bien en régime chaotique que turbulent. En particulier, les propriétés du mélange turbulent s'expriment à travers ce terme. L'équation (8.1) se réduit, si le fluide est au repos, à :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}\right), \tag{8.2}$$

l'équation (8.2) exprime le lissage et l'homogénéisation par la diffusion moléculaire. L'état final est atteint lorsque $\partial\xi/\partial t = 0$ à chaque position dans le fluide. Dans ce cas, le champ scalaire ne dépend plus de la position et le mélange est parfaitement homogène.

1. La machine de calcul *Thor* est un cluster MPI SGI ICE-X de 2300 cœurs. Il est composé de 115 lames de calcul bi-socket Intel(R) Xeon(R) `CPU` E5-2680 v2 @ 2.80GHz (20 cœurs par lames) avec 32 Go de mémoire par socket soit 3.2 Go par cœurs.

2. On note ici que si on se place dans un repère lié à une particule fluide, la variation de ξ associée à cette particule ne dépend que du Laplacien de ξ. Si ce point représente un maximum local du champ scalaire (respectivement un minimum), le Laplacien est négatif (respectivement positif) et la valeur du champ scalaire ne peut que décroître (respectivement croître). Par conséquent, il est toujours possible de majorer et de minorer le champ scalaire à un instant donné.

Dans la situation d'advection pure, l'évolution du champ scalaire est gouvernée par :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\xi) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \xi) = 0, \tag{8.3}$$

le terme d'advection n'a pas d'effet de "lissage" sur le champ scalaire, mais seulement un effet de transport qui déplace des quantités scalaires d'un endroit à l'autre dans le fluide. Tant que le champ de vitesse est présent, le champ scalaire instantané varie en fonction de la position et n'atteint pas d'état stationnaire.

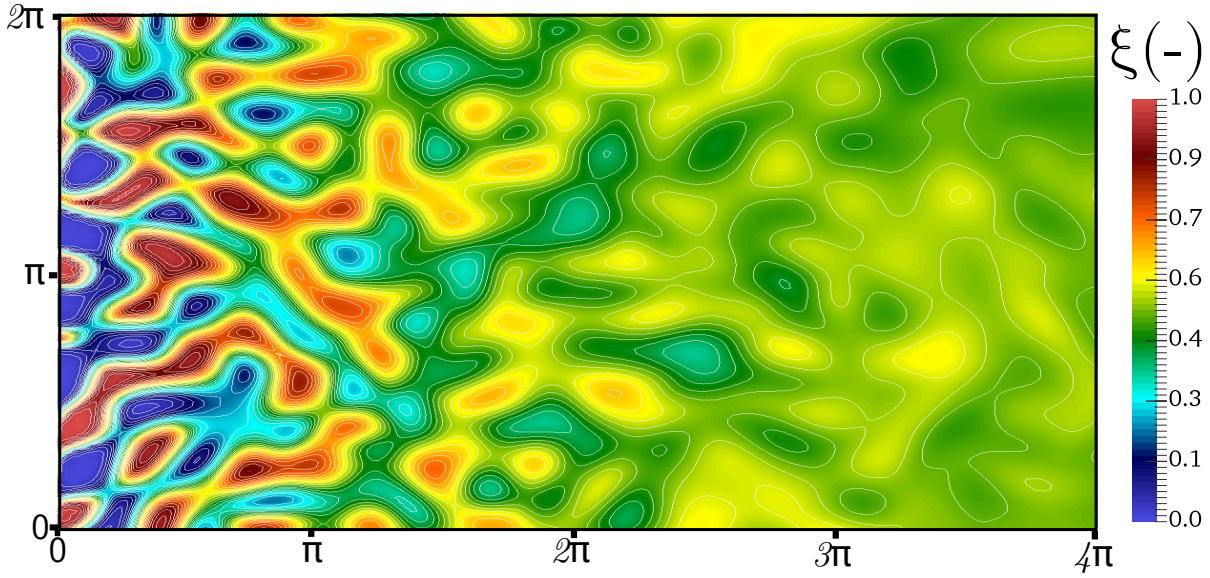
En présence d'un choc, qui induit une production barocline de vorticité du fait du désalignement des gradients de pression et de densité, le processus d'homogénéisation du champ scalaire s'intensifie et s'accélère. Cette accélération du mélange scalaire est rencontrée dans le cas d'interaction entre un choc et une inhomogénéité cylindrique constituée de bulles d'hélium placée dans l'air expérimentalement par Haas et Sturtevant [110] et numériquement par Picone et Boris [211]. Pour visualiser l'effet du choc normal sur le champ du scalaire passif, on présente sur la Figure 8.1 le champ scalaire superposé à 30 iso-lignes de ξ pour le cas de référence $M_1 = 1.7$ avec et sans choc normal. On constate pour les deux cas une décroissance de fluctuations du scalaire passif identique jusqu'au plan du choc. À la traversée du choc, on remarque une plus grande décroissance des fluctuations pour le cas choqué. En outre, on constate une plus grande production de petites échelles du champ scalaire résultant de l'amplification des gradients instantanés. La structure du champ scalaire et l'homogénéisation du mélange scalaire sont plus marquées dans le cas avec choc normal par rapport au cas sans choc. Dans les sections qui vont suivre, nous allons quantifier l'impact du choc normal sur le mélange à petites échelles.

8.3 Gradient instantané du scalaire et dissipation scalaire

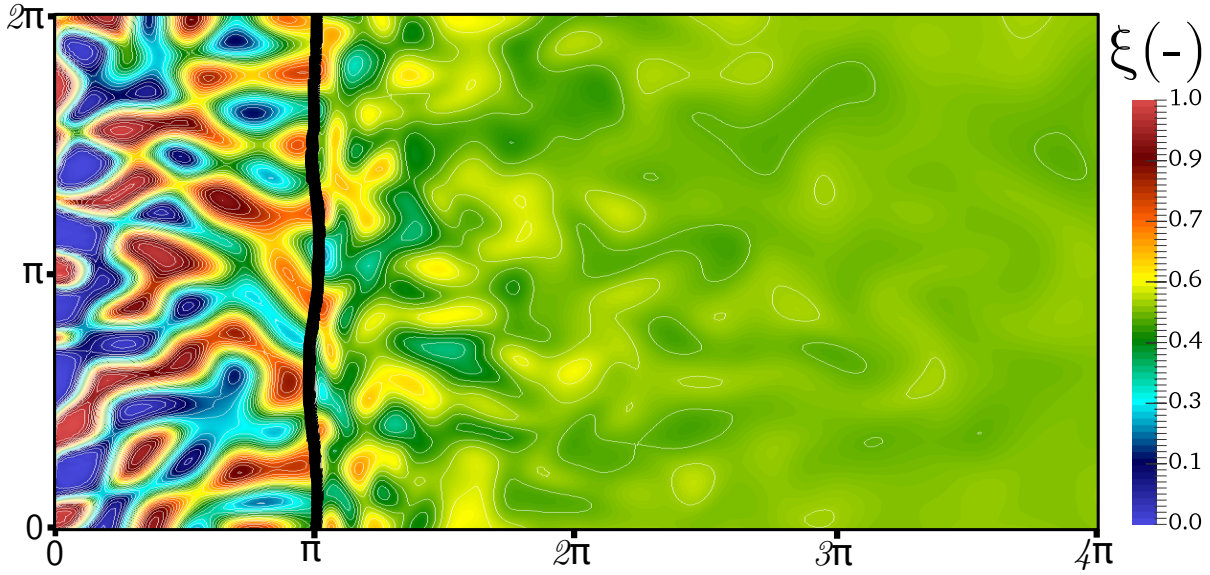
L'analyse statistique du mélange turbulent se fait suivant plusieurs méthodes. Parmi ces méthodes, on trouve l'étude des moments statistiques ou des fonctions de densité de probabilité en un point (PDF). Nous nous intéressons ici à l'évolution des deux premiers moments. La méthode des moments est particulièrement utilisée en mécanique des fluides pour modéliser numériquement le mélange en écoulement turbulent. L'équation pour le scalaire moyen est obtenu en moyennant (8.1) :

$$\frac{\partial\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi}\right)}{\partial t} + \frac{\partial\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{\xi}\right)}{\partial x_i} = \frac{\partial\left(\overline{\rho D\frac{\partial\xi}{\partial x_i}}\right)}{\partial x_i} - \frac{\partial\left(\overline{\rho u_i''\xi''}\right)}{\partial x_i}, \tag{8.4}$$

dans l'équation (8.4), le premier terme du membre de droite est le flux moléculaire de la moyenne, le second est le flux turbulent scalaire. Ce dernier représente l'homogénéisation aux grandes échelles du champ scalaire par le champ de vitesse fluctuant. Pour examiner le niveau du mélange aux plus petites échelles, on s'intéresse à l'évolution de la variance des fluctuations de scalaire $\widetilde{\xi''^2}$. En effet, la moyenne du scalaire, $\overline{\xi}$, ne fournit aucune information sur le micro-



(a) Sans choc



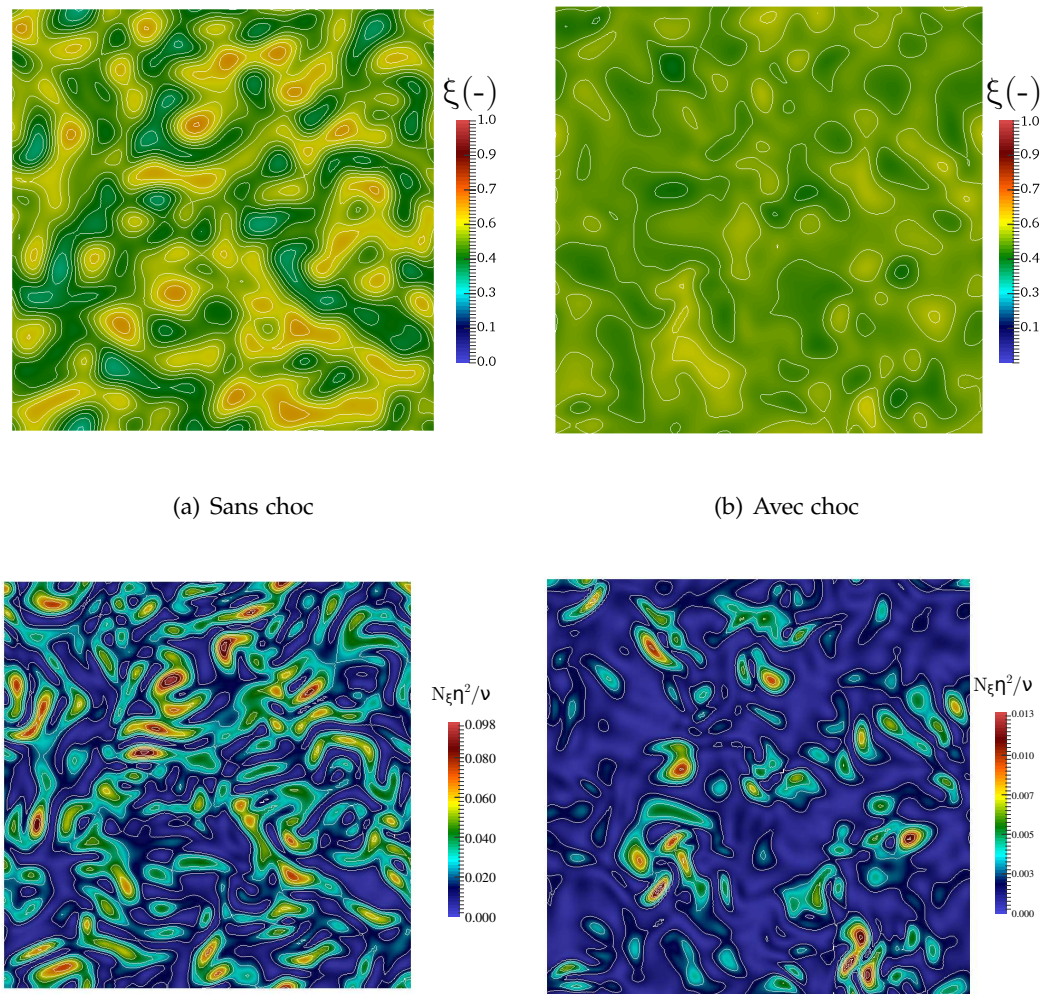
(b) Avec choc

Figure 8.1. *Visualisation d'un champ de scalaire passif ξ instantané (plan $x_3 = \pi$) superposé à 30 iso-lignes de ξ.*

mélange. L'équation (8.7) présentant le transport de la variance (présentée dans la section §8.3.1), fait apparaître le taux moyen de dissipation scalaire de l'énergie des fluctuations :

$$\rho\widetilde{\epsilon_\xi} = \overline{\rho D \frac{\partial \xi''}{\partial x_i}\frac{\partial \xi''}{\partial x_i}}, \tag{8.5}$$

La quantité $\rho\widetilde{\epsilon_\xi}$ s'écrit directement en fonction du carré de la norme du gradient fluctuant. Contrairement à la dissipation d'énergie cinétique qui détruit les fluctuations de vitesse et transforme leur énergie en chaleur, la dissipation scalaire détruit les fluctuations du scalaire sans transformation. On constate que la variance du scalaire diminue tant que la dissipation scalaire ne s'annule pas, c'est-à-dire tant que le champ scalaire n'est pas uniforme et égal en tout point à la moyenne.



(a) Sans choc (b) Avec choc

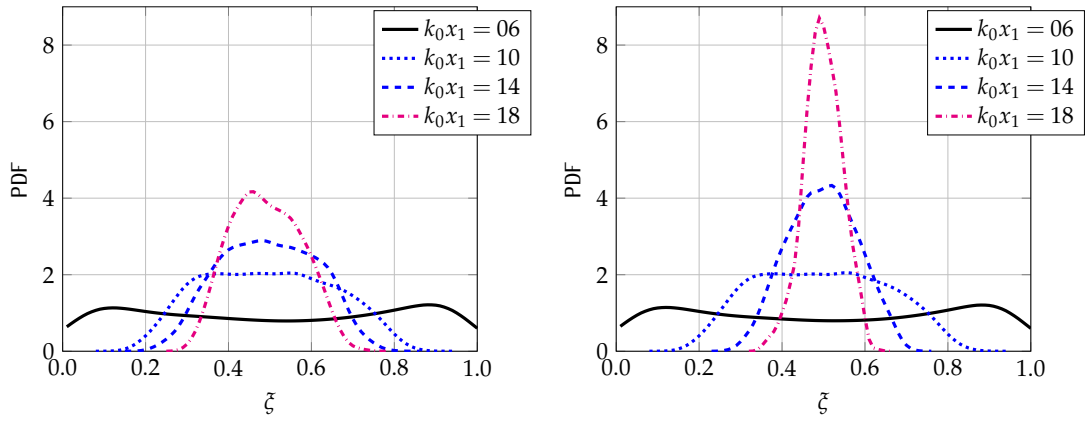
(c) Sans choc (d) Avec choc

Figure 8.2. *Champs instantanés des champs scalaires (première ligne) et des champs SDR normalisés (deuxième ligne) obtenus au plan transversal correspondant à l'abscisse normalisée $k_0x_1 = 16.0$ pour le cas non-choqué (colonne à gauche) et le cas choqué (colonne à droite) pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

La dissipation scalaire joue un rôle fondamental dans le mélange turbulent car elle repré-

sente le taux de décroissance des fluctuations d'une espèce passive, c'est-à-dire l'efficacité du mélange à petite échelle. La compréhension détaillée de la dissipation scalaire est importante d'une part pour sa signification physique comme on l'a souligné ci-dessus et, d'autre part, pour son rôle direct dans la modélisation du mélange turbulent. La Figure 8.2 présente une visualisation instantanée d'un champ de scalaire ξ et le champ du taux de dissipation scalaire (SDR pour *Scalar Dissipation Rate*) défini par $N_\xi = D\,(\partial\xi/\partial x_k)\,(\partial\xi/\partial x_k)$, en aval du choc en absence et en présence du choc, après qu'un état statistiquement stationnaire a été atteint. Le mélange scalaire s'amplifie considérablement au passage du choc comme l'indique la Figure 8.2. Dans les zones de fort gradient où la dissipation est importante, comme la diffusion a tendance à faire disparaître les gradients, la dissipation elle-même s'atténue au cours du processus d'homogénéisation. La dissipation scalaire détruit les fluctuations scalaires comme le montre l'équation (8.7).

Pour démontrer l'efficacité du choc à développer considérablement le processus de mélange moléculaire, nous étudions les fonctions densité de probabilité (PDFs) de ξ. Celles-ci sont présentées sur la Figure 8.3, ces PDFs sont évaluées en quatre abscisses normalisées $k_0x_1 = 6,\ 10,\ 14$ et 18. Au niveau des deux premières abscisses, la PDF du scalaire est quasiment identique pour le cas avec et sans choc. En présence du choc, la PDF tend plus rapidement vers une loi quasi-normale (Distribution Gaussienne) ayant des valeurs d'écart-type plus faibles par rapport au cas ne présentant pas de choc.



(a) Sans choc (b) Avec choc

Figure 8.3. *PDF de ξ situées à 4 abscisses pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

Tout comme le champ de vitesse, afin de comparer plus finement nos PDFs à la gaussienne, les moments d'ordre 3 et 4 sont évalués à l'aide de deux facteurs $\mathcal{S}$ pour le *Skewness* et $\mathcal{F}$ pour *Flatness*. On rappelle que, si le facteur de dissymétrie $\mathcal{S}$ est égal à zéro et celui d'aplatissement $\mathcal{F}$ à trois, la distribution est proche d'une Gaussienne.

Les valeurs de *kurtosis* mesurées aux quatre abscisses normalisées $k_0x_1 = 6,\ 10,\ 14$ et 18 sont reportées dans le Tableau 8.1. Les valeurs obtenues en présence du choc illustrent les précédentes remarques concernant la qualité du mélange moléculaire. En effet, les valeurs du Flatness et de Skewness sont proches des valeurs de la distribution gaussienne dans les

	avec choc		sans choc	
	$\mathcal{S}$	$\mathcal{F}$	$\mathcal{S}$	$\mathcal{F}$
$k_0x_1 = 06.0$	-0.016	1.610	-0.016	1.613
$k_0x_1 = 10.0$	$+0.069$	2.039	$+0.069$	2.041
$k_0x_1 = 14.0$	-0.018	2.415	-0.007	2.198
$k_0x_1 = 18.0$	-0.176	3.021	$+0.128$	2.291

***Tableau 8.1** – Valeurs de dissymétrie et d'aplatissement pour le scalaire passif*

plans en aval du choc confirmant la rapide homogénéisation du champ scalaire. Ainsi, la production de petites échelles du champ scalaire résultant de l'amplification des gradients instantanés est plus favorisée et accélérée en présence du choc.

L'interaction des fluctuations scalaires avec l'onde de choc est ensuite analysée en termes d'échelles caractéristiques en comparant les spectres scalaires bidimensionnels normalisés $E_{\tilde{\xi}}$ obtenus à une abscisse pré-choc ($k_0x_1 = 11.6$) avec ceux obtenus à l'abscisse post-choc ($k_0x_1 = 16.4$). Les spectres d'énergie scalaire évalués à ces deux abscisses sont représentés sur la Figure 8.4 pour le cas de référence $M_1 = 1.7$ en présence et en absence du choc. Comme prévu, les spectres obtenus en amont de l'interaction sont presque identiques que l'on considère ou non la présence de l'onde de choc normal. En aval de l'interaction et suite à la décroissance des fluctuations scalaires, les niveaux d'énergie scalaire obtenus sont également atténués pour le cas avec et sans choc. Néanmoins, nous notons une différence remarquable entre les cas non choqués et choqués puisque, pour ce dernier, des niveaux d'énergie scalaire significatifs sont maintenus aux plus grands nombres d'ondes.

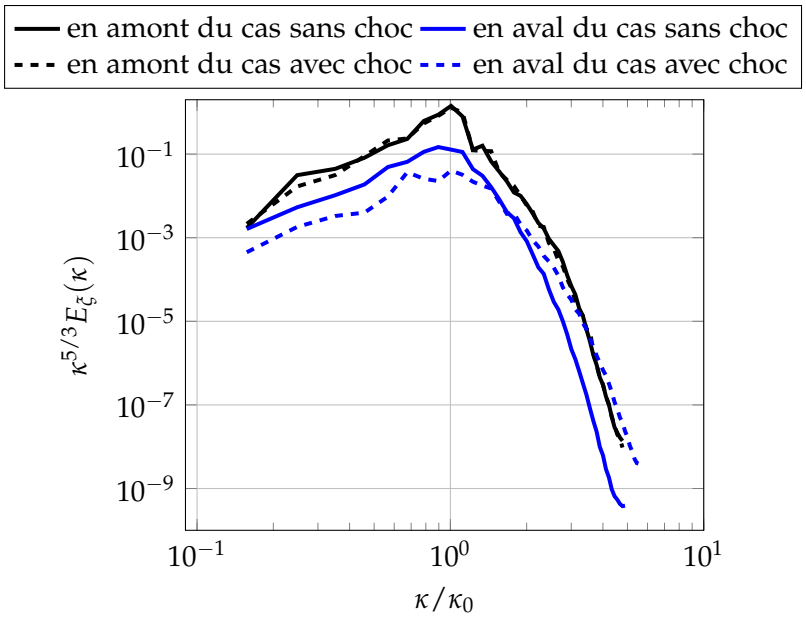


Figure 8.4. *Spectre du scalaire passif $E_{\tilde{\xi}}(\kappa)$ tracé en fonction du nombre d'onde normalisé κ/κ_0 à différentes abscisses*

Les spectres énergétiques montrent ainsi que l'amplification des grandeurs turbulentes se produit préférentiellement aux grands nombres d'onde pour les fluctuations du scalaire passif à la traversée du choc, ce qui conduit à une réduction des micro-échelles scalaires de

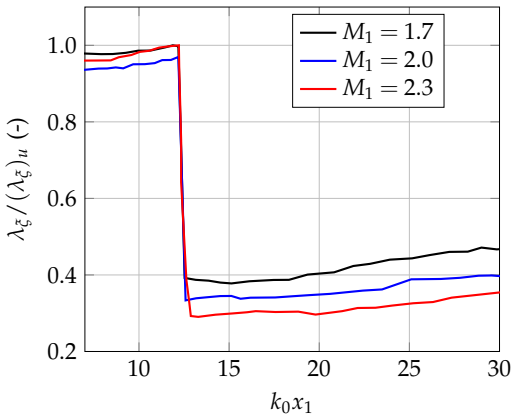


Figure 8.5. *Évolution longitudinale de la micro-échelle scalaire de Taylor normalisée.*

Taylor définie par :

$$\lambda_\xi = \frac{1}{3}\left(\sqrt{\frac{\overline{\xi^2} - \overline{\xi}^2}{\left(\overline{\frac{\partial \xi'}{\partial x_1}}\right)^2}} + \sqrt{\frac{\overline{\xi^2} - \overline{\xi}^2}{\left(\overline{\frac{\partial \xi'}{\partial x_2}}\right)^2}} + \sqrt{\frac{\overline{\xi^2} - \overline{\xi}^2}{\left(\overline{\frac{\partial \xi'}{\partial x_3}}\right)^2}}\right) \tag{8.6}$$

L'évolution longitudinale de la micro-échelle scalaire de Taylor normalisée par sa valeur juste en amont de l'onde de choc est reportée sur la Figure 8.5. Cette figure confirme l'intensification du mélange scalaire à la traversée du choc. Notons en plus que plus le Mach amont M_1 est grande plus la réduction de λ_ξ est grande.

8.3.1 Champ scalaire : mélange turbulent

Nous étudions maintenant la variance du scalaire dans la configuration d'interaction entre un champ turbulent et un choc normal. La répartition des PDFs des trois composantes du gradient scalaire est présenté dans la Figure 8.6. Comme prévu, nous remarquons que la valeur moyenne des trois dérivations scalaires est nulle, ce qui est totalement compatible avec l'homogénéité du champ scalaire. La Figure 8.6 montre que l'onde de choc est une source d'anisotropie à petite échelle pour le champ scalaire : la variance de la deuxième et troisième composante du gradient scalaire est en effet considérablement réduite par rapport à sa première composante

La variance $\widetilde{\xi''^2}$ est une grandeur très importante puisqu'elle caractérise la dispersion des valeurs du scalaire autour de sa valeur moyenne. Son équation de transport exacte peut être obtenue à partir de l'équation de transport instantanée du scalaire (8.7) en effectuant la

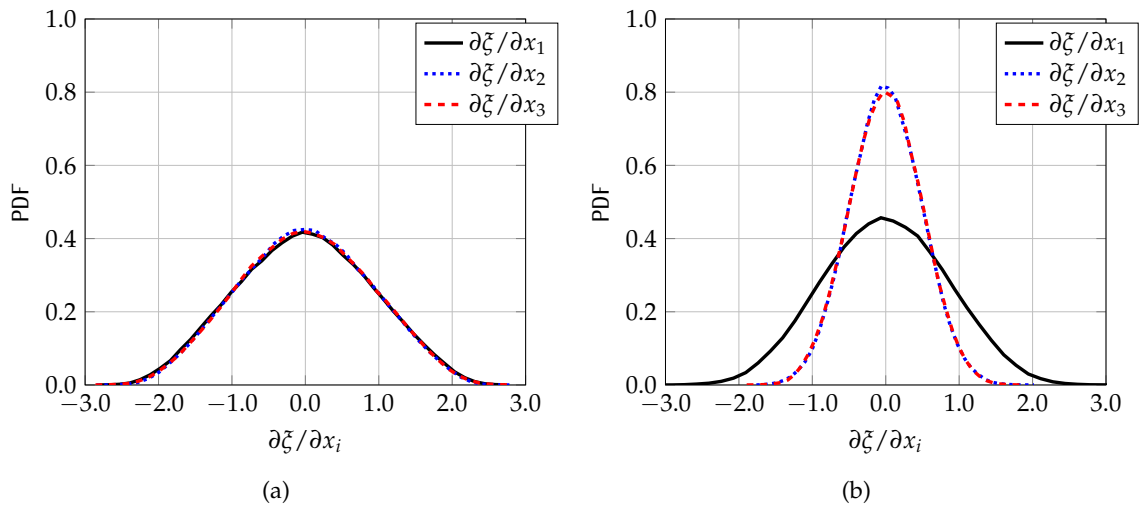


Figure 8.6. *PDFs du gradient scalaire en amont du choc (a) et en aval du choc (b) pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

différence $\widetilde{\xi^2} - \widetilde{\xi}^2$. Cette équation est donnée par :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho}\widetilde{\xi''^2}\right) = &\underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\xi''^2}\right)}_{\mathscr{T}_2} \underbrace{+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial \xi''^2}{\partial x_k}}\right)}_{\mathscr{T}_3} \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho u''_k\xi''^2}\right)}_{\mathscr{T}_4} \\ &\underbrace{-2\overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}}}_{\mathscr{T}_5} \underbrace{-2\overline{\rho u''_k\xi''}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}}_{\mathscr{T}_6} \underbrace{+2\overline{\xi''\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho D\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\right)}}_{\mathscr{T}_7}\end{aligned} \tag{8.7}$$

Dans cette équation apparaissent un terme d'accumulation, un terme de convection dans le membre de gauche de l'équation et un terme de diffusion moléculaire dans le membre de droite. Les trois termes du membre de droite représentent respectivement le transport moléculaire et turbulent, le terme de dissipation ainsi que le terme de production par le gradient moyen. On notera que la dernière contribution est souvent négligée. La production de variance reflète l'hétérogénéité du mélange local. En revanche, sa destruction caractérise l'action des processus moléculaires à travers la valeur moyenne du taux de dissipation scalaire (SDR) $N_\xi = D(\partial\xi/\partial x_k)(\partial\xi/\partial x_k)$ du traceur passif. On définit également $\widetilde{\varepsilon}_\xi$ le taux de dissipation scalaire moyen des fluctuations de ξ. Il est défini par :

$$\rho\widetilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} \tag{8.8}$$

Pour des valeurs du nombre de Reynolds suffisamment élevées, on montre que ce terme est comparable au taux de dissipation scalaire moyen $\widetilde{N_\xi}$:

$$\rho\widetilde{\varepsilon}_\xi = \overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}} = \overline{\rho}\widetilde{N_\xi} - \overline{\rho D}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k}\frac{\partial\widetilde{\xi}}{\partial x_k} \approx \overline{\rho}\widetilde{N_\xi} \tag{8.9}$$

Dans le cas d'une THI, la plupart des termes de l'équation de bilan (8.7) se réduisent aux termes de surface et leurs intégrales sur l'ensemble du domaine de calcul sont nulles, signifiant ainsi qu'elles ne modifient pas le niveau de variance scalaire. Ce constat s'applique aux termes $\mathscr{T}_2$, $\mathscr{T}_3$ et $\mathscr{T}_4$. Étant donné qu'il n'y a pas de gradient de concentration moyenne dans le cas d'une THI, les termes $\mathscr{T}_6$ et $\mathscr{T}_7$ s'annuleront également, et seul le terme de la SDR $\mathscr{T}_5$ sera non nul dans le côté droit de (8.9).

Pour la dégénérescence spatiale de THI indépendamment de la présence ou non de l'onde de choc, l'écoulement n'est pas homogène le long de la direction longitudinale, les termes $\mathscr{T}_2$, $\mathscr{T}_3$, $\mathscr{T}_4$ et $\mathscr{T}_5$ doivent ainsi être pris en considération. Cependant, comme il n'y a pas de gradient moyen ($\partial\widetilde{\xi}/\partial x_k$ pour $k = 1, \cdots, 3$), les deux derniers termes du membre de droite de l'équation (8.9) sont nuls.

Sur la Figure 8.7, nous trouvons, comme nous nous y attendons, que la variance scalaire diminue spatialement dans les cas avec choc et sans choc. Néanmoins, la décroissance de la variance du scalaire passif est plus intense en présence du choc. Ce résultat est cohérent avec d'autres études conduites qui soulignent l'amélioration du mélange par des ondes de choc grâce (i) à la déviation des lignes de courant par le choc et (ii) la génération de structures tourbillonnaires dans ces régions [120].

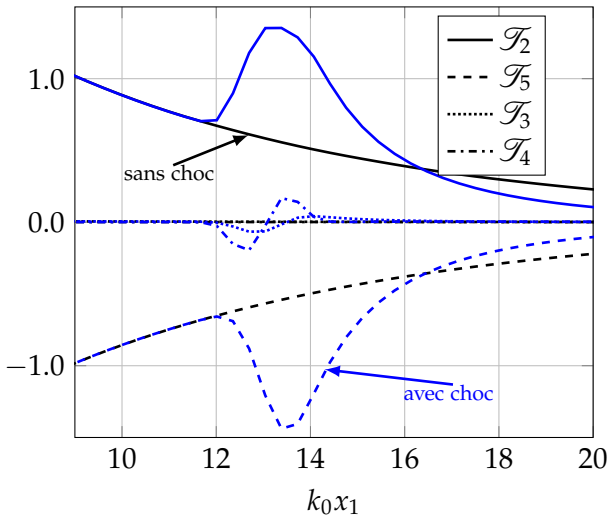


Figure 8.7. *Bilan des termes de l'équation de la variance du scalaire passif (8.7) normalisés par $\rho_u u_{1,u} (\widetilde{\xi''^2})_u / l_T$. Notons que les termes négligeables en présence et en absence du choc ne sont pas affichés.*

De même, comme le montre la Figure 8.7, les termes $\mathscr{T}_3$ et $\mathscr{T}_4$ s'annulent en l'absence de l'onde de choc et confirme également que l'action du taux de dissipation scalaire turbulente (SDR), qui apparaît avec un signe moins dans l'équation de transport de variance scalaire, i.e. $\mathscr{T}_5$, réduit de façon monotone le niveau de variance scalaire. Cela correspond à l'homogénéisation du champ scalaire sous l'action des effets de diffusion moléculaire. Ce terme de consommation est considérablement intensifié après l'onde de choc.

L'évolution longitudinale de la variance du scalaire $\widetilde{\xi''^2}$ et de la SDR turbulente $\widetilde{\varepsilon}_{\xi}$ pour le cas choqué et non choqué est reportée sur la Figure 8.8(a) et la Figure 8.8(b).

Ces deux figures montrent que la région choquée est associée à une réduction plus

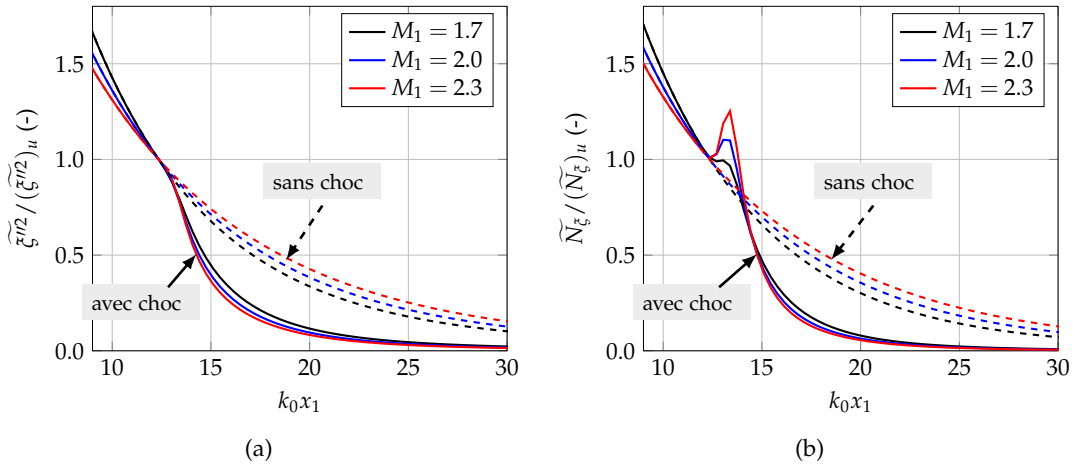


Figure 8.8. *Évolution longitudinale de la variance scalaire turbulente $\widetilde{\xi''^2}$ normalisée (a) et la dissipation scalaire turbulente $\widetilde{N_\xi}$ normalisée (b).*

rapide de la magnitude des deux quantités, confirmant ainsi l'amélioration du processus de mélange induit par la présence du choc. En plus, ces deux figures montrent clairement que l'amélioration du mélange induit par choc augmente avec l'intensité du choc, c'est-à-dire la valeur du nombre de Mach.

Les valeurs du taux d'amplification des fluctuations scalaires $G_\xi = (\widetilde{\xi''^2})_d / (\widetilde{\xi''^2})_u$ ont été évaluées. Les valeurs correspondantes sont rapportées dans le Tableau 8.2 avec le nombre de Mach M et $F = M_t / (\sqrt{Re_\lambda} \Delta M)$. Les valeurs obtenues montrent que l'atténuation des fluctuations scalaires augmente presque linéairement avec la valeur du nombre de Mach, c'est-à-dire que G_ξ diminue avec M alors qu'il augmente avec F.

	M	M_t	F	G	G_ξ
case 1	1.7	0.17	0.052	1.490	0.312
case 2	2.0	0.17	0.037	1.563	0.268
case 3	2.3	0.17	0.028	1.580	0.240

Tableau 8.2 *– Facteur d'atténuation des fluctuations scalaires $G_\xi = (\widetilde{\xi''^2})_d / (\widetilde{\xi''^2})_u$ versus $F = M_t / (\sqrt{Re_\lambda} \Delta M)$*

8.3.2 Interaction entre le champ de vitesse et le champ scalaire

Les simulations numériques [6, 196, 219] et les expériences [34, 35] révèlent que le champ scalaire s'organise principalement sous forme de nappes [219]. Les surfaces iso-scalaires sont séparées par des zones où les gradients scalaires sont très forts. Ces structures en nappes suggèrent qu'il existe une relation étroite entre le gradient du scalaire et le champ de déformation turbulent. Cette relation a beaucoup été explorée numériquement [219, 196] et expérimentalement [286]. Les structures en nappes ne semblent a priori pas surprenantes à partir des observations faites en turbulence montrant que la valeur propre intermédiaire

e_2 est généralement positive. Le champ de déformation turbulente étire les gradients dans deux directions et les comprime dans une direction [31]. En utilisant les invariants du tenseur des gradients de vitesse, Pumir [219] montre que les forts gradients du champ scalaire sont principalement localisés dans les régions dominées par les déformations. Ces observations ont été confirmées par des statistiques Lagrangiennes réalisées à différents nombres de Schmidt [31]. Les visualisations obtenues dans les DNS [230] montrent que les nappes de forts gradients sont aussi corrélées avec des régions de déformations modérées. Ruetsch et Maxey [230] affirment que ce n'est pas l'intensité de la déformation mais la persistance et l'uniformité des déformations qui sont importantes pour produire de forts gradients. Les simulations montrent aussi que les forts gradients du scalaire sont localisés en périphérie des filaments de vorticité [142, 273]. De plus, nous avons vu que le mélange était piloté par le taux de dissipation scalaire (SDR). Celui-ci est proportionnel au gradient du scalaire passif. Ainsi, le mélange est d'autant plus rapide qu'il existe des zones de fort gradient. Dans ces zones, la dissipation est forte et les flux scalaires dus à la diffusion moléculaire sont importants.

L'influence du champ de vitesse sur le mélange est indirecte. Pour illustrer cette action, nous considérons la forme suivante de l'équation de transport du taux de dissipation scalaire [194, 134, 178, 193] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{\epsilon}_\xi}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\widetilde{\epsilon}_\xi\right)}_{\mathscr{Q}_2} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho D\frac{\partial \epsilon_\xi}{\partial x_k}}\right)}_{\mathscr{Q}_3} - \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho u_k'' \epsilon_\xi}}{\partial x_k}}_{\mathscr{Q}_4} - \underbrace{2\overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_i}\frac{\partial u_k''}{\partial x_i}}\frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_k}}_{\mathscr{Q}_5} \\ \underbrace{-2\overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_i}}\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_i}}_{\mathscr{Q}_6} - \underbrace{2\overline{\rho D u_k''\frac{\partial \xi''}{\partial x_i}}\frac{\partial^2 \widetilde{\xi}}{\partial x_k \partial x_i}}_{\mathscr{Q}_7} \\ \underbrace{-2\overline{\rho D\frac{\partial \xi''}{\partial x_k}\frac{\partial \xi''}{\partial x_i}\frac{\partial u_k''}{\partial x_i}}}_{\mathscr{Q}_8} - \underbrace{2\overline{\rho D^2\frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k}\frac{\partial^2 \xi''}{\partial x_i \partial x_k}}}_{\mathscr{Q}_9}\end{aligned} \tag{8.10}$$

Le terme $\mathscr{Q}_4$ représente l'effet de la diffusion turbulente, le terme $\mathscr{Q}_5$ la production par le gradient de la concentration moyenne, le terme $\mathscr{Q}_6$ la production par le gradient de la vitesse moyenne et le terme $\mathscr{Q}_7$ la courbure du champ de composition moyenne. Le terme $\mathscr{Q}_8$ correspond à l'effet d'étirement par la turbulence, le terme $\mathscr{Q}_9$représente la courbure locale. Pour les écoulements à grand nombre de Reynolds, les termes dominants sont $\mathscr{Q}_8$ et $\mathscr{Q}_9$ (d'ordre $Re_t^{\frac{1}{2}}$) [178, 193]. Les termes $\mathscr{Q}_4$, $\mathscr{Q}_5$ et $\mathscr{Q}_6$ sont d'ordre Re_t^0 tandis que le terme $\mathscr{Q}_7$ est lui d'ordre $Re_t^{-\frac{1}{2}}$.

Le taux de dissipation scalaire $\widetilde{\varepsilon}_\xi$ n'est pas une quantité conservée et pour comprendre comment elle se crée et disparaît, il faut considérer les deux termes source de l'équation précédente. Le premier, le terme $\mathscr{Q}_9$, est forcément négatif. Il montre que dans les zones de fort gradient où la dissipation est importante, comme la diffusion à tendance à détruire les gradients, la dissipation est elle-même dissipée lors du processus d'homogénéisation. Le second, le terme $\mathscr{Q}_8$, fait explicitement intervenir le champ de vitesse. Il s'agit du terme

d'interaction entre la turbulence et le champ scalaire. Il représente la création de dissipation dans les zones de fort étirement. La turbulence, en étirant le champ scalaire, crée des gradients importants et favorise ainsi l'homogénéisation du scalaire. C'est le mélange turbulent. Le rapport entre la viscosité moléculaire (qui agit sur le bilan de quantité de mouvement) et le coefficient de diffusion du scalaire est essentiel. Ce rapport sans dimension est appelé nombre de Schmidt.

L'analyse d'ordre de grandeur de l'équation de transport (8.10) confirme ainsi que la SDR est principalement régi par deux termes dominants (i) la contribution dissipative et (ii) la corrélation du 3ème ordre entre le tenseur des gradients de vitesse et le tenseur d'anisotropie des petites échelles [178, 193]. Le terme (i) inclut l'influence de l'étirement turbulent qui tend à accroître la valeur du gradient local $g_\xi = (\boldsymbol{g_\xi}.\boldsymbol{g_\xi})^{1/2}$ et donc le taux de dissipation $N_\xi = D.g_\xi.g_\xi$. L'efficacité du mélange scalaire semble être contrôlée par cette dernière quantité qui est souvent nommée terme d'interaction turbulence-scalaire. Il peut être établi que seule la partie symétrique S_{ij} du tenseur des gradients de vitesse contribue à ce terme. Dès lors, il est classique d'analyser la contribution de ce terme dans l'espace des vecteurs propres du tenseur des taux de déformations S_{ij} [259, 15]. Ce terme a été étudié de manière exhaustive dans le contexte de la combustion turbulente qu'elle soit pré-mélangée ou non à travers l'analyse de la variable d'avancement pour les conditions pré-mélangées [41] ou de la fraction de mélange pour les conditions non pré-mélangées [274, 6, 259, 61].

La Figure 8.9 illustre, dans un cas bidimensionnel, l'influence de ces orientations sur l'amplitude du gradient du scalaire passif. Le vecteur $\boldsymbol{e_1}$ correspond à la direction principale d'étirement et $\boldsymbol{e_3}$ à la direction principale de compression. Lorsque le gradient scalaire est aligné avec la direction principale de compression $\boldsymbol{e_3}$, l'épaisseur caractéristique de la couche de scalaire tend à diminuer ce qui entraîne l'augmentation du gradient ainsi que du *SDR*. Inversement, si le gradient scalaire s'aligne avec la direction principale d'étirement, la norme du gradient tend à décroître. Autrement dit, l'amplification du gradient scalaire par le champ de vitesse requiert un alignement préférentiel avec la direction principale de compression. Une fois exprimé dans l'espace des vecteurs propres du tenseur des taux de déformation S_{ij}, le terme d'interaction turbulence-scalaire devient :

$$\mathrm{TSI} = \overline{-2\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial \xi}{\partial x_j}} = \overline{-2\rho N_\xi \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \cos^2\theta_i}, \tag{8.11}$$

où les quantités λ_i représentent les valeurs propres du tenseur des taux de déformation avec $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$. Dans un écoulement turbulent incompressible, la trace du tenseur S_{ij} est nulle c'est à dire que la somme les trois valeurs propres est nulle. La valeur λ_1 correspond à la direction principale d'étirement la plus importante tandis que λ_3 est associé à la direction principale de compression la plus importante. La valeur propre intermédiaire est notée λ_2. La variable θ_i correspond à l'angle entre la direction principale e_i et la direction normale aux iso-lignes de ξ, *i.e* $\boldsymbol{n_\xi} = \boldsymbol{g_\xi}/g_\xi$. Il est évident, d'après l'équation (8.11), que le signe de la contribution associée à l'interaction turbulence–scalaire dépendra des orientations θ_i et des

valeurs propres λ_i associées.

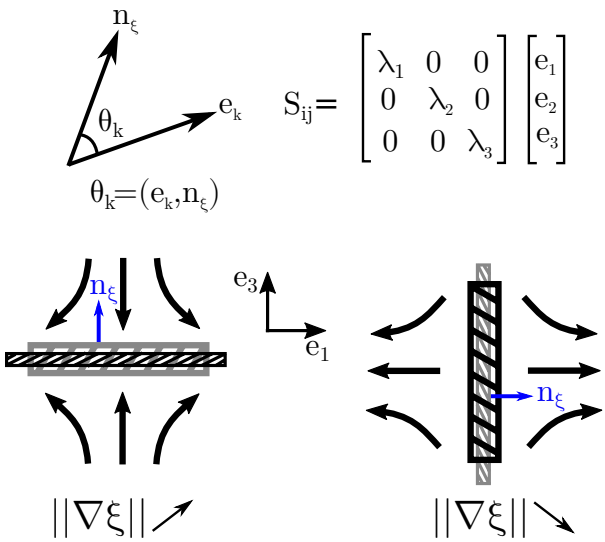


Figure 8.9. *Schématisation de l'action du champ de vitesse sur le champ scalaire.*

Comme le soulignent Gonzalez et Paranthoën [96], le mélange dans les fluides repose (i) sur les phénomènes d'étirement d'éléments fluides linéiques ou surfaciques provoqués par les gradients de vitesse et (ii) sur la diffusion moléculaire. Il est admis que l'étirement facilite le mélange local en favorisant la diffusion moléculaire par l'augmentation de la surface des interfaces et le rapprochement des portions de fluides initialement séparées. Souvent, la qualité de "bon mélange" suppose une répartition uniforme de l'étirement dans l'écoulement.

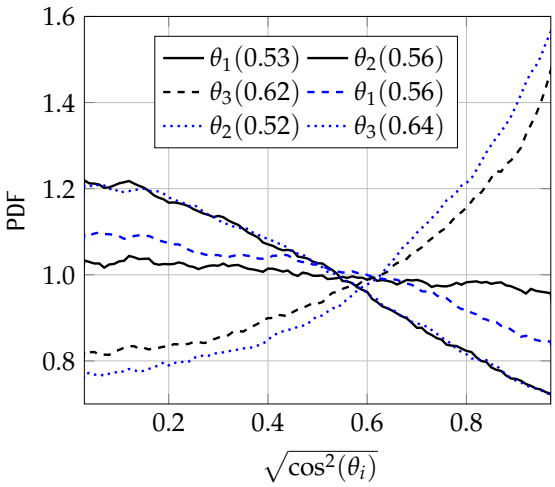


Figure 8.10. *PDFs du cosinus de l'angle entre le gradient scalaire normalisé n_ξ et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations $\mathcal{S}_{ij}$ en amont (traits noirs) et en aval (traits bleus) pour le cas de référence $M_1 = 1.7$.*

Il a été mis en évidence, par des simulations numériques [6, 196, 219, 260, 31], ainsi que par le biais d'expériences [107, 108, 109], que, statistiquement, pour une turbulence homogène incompressible, le gradient scalaire s'aligne de manière privilégiée avec la direction de compression maximale. Ceci entraîne donc le terme $-2\rho D(\partial\xi/\partial x_i)(\partial u_i/\partial x_j)(\partial\xi/\partial x_j)$ à une contribution positive au bilan du taux de dissipation scalaire. Ces orientations sont analysées à travers les fonctions densité de probabilité de $\cos^2\theta_i$.

La Figure 8.10 présente les distributions d'alignement du gradient scalaire avec les directions principales de déformations. En amont du choc, Le gradient scalaire :

- s'aligne statistiquement mieux avec la direction de compression e_3 ;

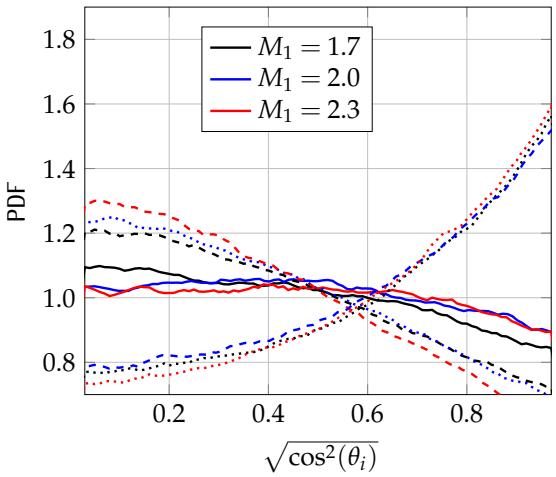


Figure 8.11. *Comparaison entre les PDFs du cosinus de l'angle entre le gradient du scalaire normalisé n_ξ et les vecteurs propres du tenseur des taux de déformations $\mathcal{S}_{ij}$ en amont du choc pour les trois Mach $M_1 = 1.7, 2.0$ et 2.3.*

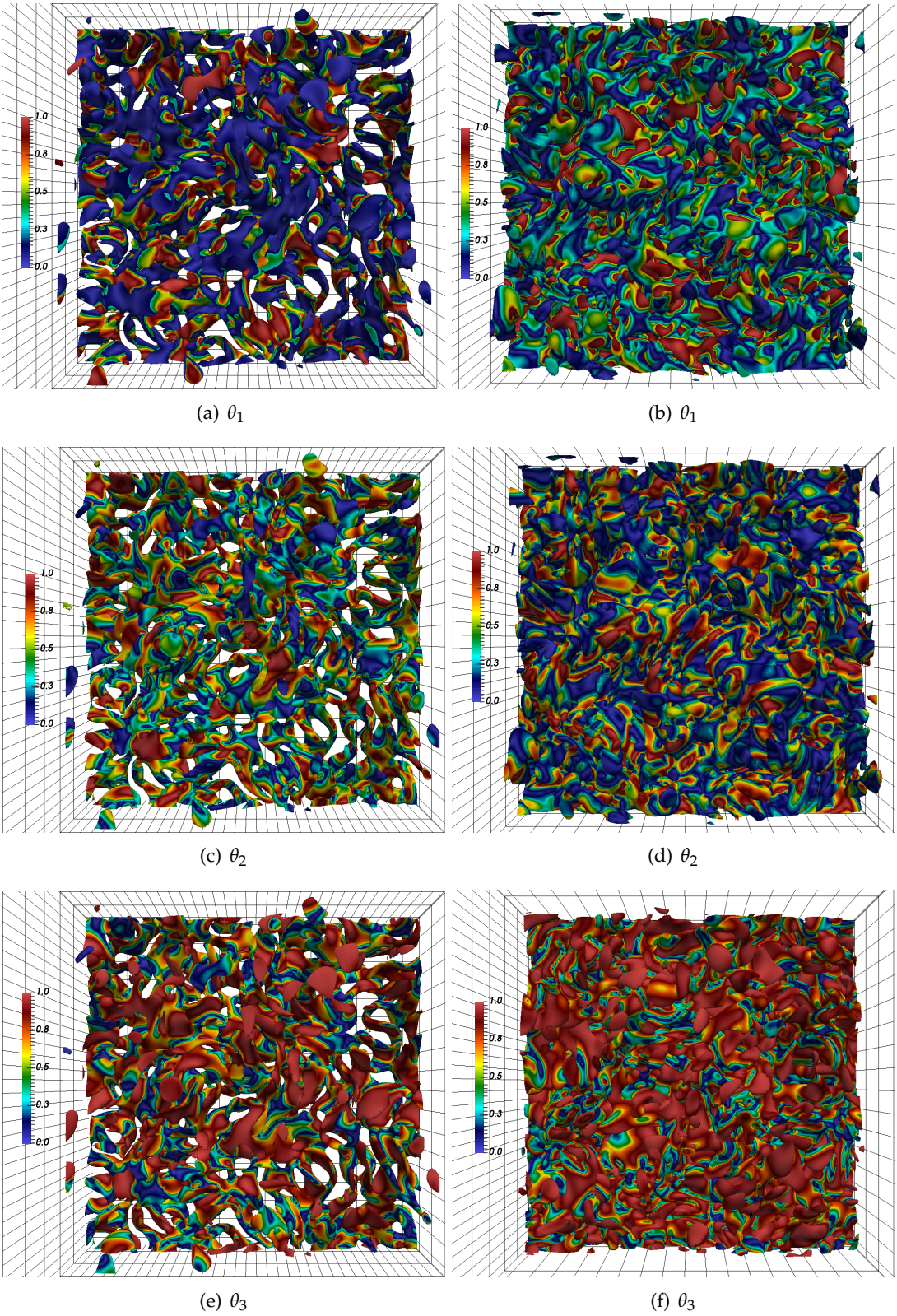
- affiche un caractère équiprobable, avec une légère préférence pour les situations présentant un gradient scalaire transversal avec la direction intermédiaire e_2 ;
- est perpendiculaire par rapport à la direction d'étirement e_1.

Ceci confirme ainsi que les statistiques de l'écoulement en amont du choc sont consistantes avec l'évolution des gradients scalaires dans la littérature [6, 196, 219, 260]. En aval du choc

- l'orientation privilégiée de n_ξ par rapport à e_3 est renforcée par le choc, puisque la valeur de $P\left(\sqrt{\cos^2(n_\xi, e_3)}\right) = 1$ est augmentée d'environ 7% ;
- l'orientation par rapport à e_2 est significativement renforcée, vu que $P\left(\sqrt{\cos^2(n_\xi, e_2)}\right) = 0$ est accrue d'environ 20%. Il est remarquable que la probabilité d'être perpendiculaire à la direction intermédiaire soit considérablement augmentée au voisinage de l'onde de choc ;
- il est remarquable que la probabilité que le gradient scalaire et e_1 sont perpendiculaires en amont du choc, est considérablement diminué en aval de l'onde de choc et, comme souligné ci-dessus, cette diminution s'accroît avec une légère augmentation de la probabilité d'alignement avec la direction la plus compressive e_3 et une augmentation significative de la probabilité au voisinage de $\cos^2(n_\xi, e_2) \approx 0$.

Si l'on revient à l'équation (8.11), nous avons une préférence statistique en aval du choc $\cos(n_\xi, e_1) = \cos(n_\xi, e_2) = 0$ et $\cos(n_\xi, e_3) = 1$. La valeur λ_3 étant définie négative, ce résultat conduit donc à la positivité du terme d'interaction turbulence–scalaire. Les tendances en aval du choc sont amplifiées avec l'augmentation de l'intensité du choc, en l'occurrence l'augmentation de la valeur du mach amont à l'entrée du domaine physique M, comme le montre la Figure 8.11.

La Figure 8.12 présente une visualisation frontale (direction x_1) d'iso-surface instantanée du gradient scalaire ($g_\xi = 0.1 g_\xi^{max}$ en amont du choc et $g_\xi = 0.8 g_\xi^{max}$ en aval du choc). Sur la première ligne (cf . Figure 8.12(a) et Figure 8.12(b)), l'iso-surface est colorée par la valeur de l'angle entre le gradient scalaire et la direction principale d'étirement, *i.e.* de $\cos\theta_1 = \cos(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$. Sur la deuxième ligne (cf. Figure 8.12(c) et Figure 8.12(d)), l'iso-surface est colorée par la valeur de l'angle entre le gradient scalaire et la direction principale intermédiaire, *i.e.* de $\cos\theta_2 = \cos(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_2})$. Finalement, sur la troisième ligne (cf. Figure 8.12(e) et Figure 8.12(f)),



(a) θ_1 (b) θ_1

(c) θ_2 (d) θ_2

(e) θ_3 (f) θ_3

Figure 8.12. *Une visualisation instantanée suivant la direction longitudinale de l'amplitude d'une iso-surface du gradient scalaire en amont du choc ($\|\nabla\xi\| = 0.8\|\nabla\xi\|_{\max}$ (colonne gauche)), et en aval du choc (colonne droite) $\|\nabla\xi\| = 0.1\|\nabla\xi\|_{\max}$ colorées par la valeur de $\cos(\theta_1)$ (première ligne), de $\cos(\theta_2)$ (deuxième ligne) et de $\cos(\theta_3)$ (troisième ligne)*

l'iso-surface est colorée par la valeur de l'angle entre le gradient scalaire et la direction principale de compression, *i.e.* de $\cos\theta_3 = \cos(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_3})$. Sur la première ligne, la proportion de bleu est affaiblie de gauche à droite : la probabilité que le gradient scalaire soit perpendiculaire à e_1 (c'est-à-dire les valeurs de $\cos(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$ autour de zéro) est diminuée. Les résultats rapportés dans la deuxième ligne illustrent la probabilité accrue d'être perpendiculaire à la direction principale intermédiaire, la proportion de couleur bleue est augmentée. Enfin, la troisième ligne montre que l'onde de choc a tendance à imposer l'alignement du gradient scalaire avec la direction principale la plus compressive (la couleur rouge est dominante), ce qui augmente le taux de mélange scalaire.

Pour obtenir une meilleure compréhension du rôle joué par chaque contribution à l'interaction turbulence-scalaire, c'est-à-dire la contribution de $\lambda_i \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$ avec $i = 1,2,3$, nous nous proposons de considérer simultanément l'amplitude des valeurs propres et les vecteurs propres du tenseur de déformation. En amont et en aval de l'onde de choc, les PDFs de chaque composante principale ($\lambda_i \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$) au terme TSI sont reportés à la Figure 8.13 pour $i = 1,2,3$. D'après cette figure et selon l'équation (8.11), le terme TSI, qui n'est rien d'autre que la somme des termes $\mathcal{Q}_5 + \mathcal{Q}_6 + \mathcal{Q}_7 + \mathcal{Q}_8$ dans l'équation de transport du taux de dissipation scalaire moyenne (8.10) peut être assimilé à un terme de production :

$$\overline{\Psi} = \overline{\sum_{i=1}^{3} \lambda_i \cos^2(\theta_i)} < 0, \quad \text{ceci implique que : } \ \mathtt{TSI} > 0. \tag{8.12}$$

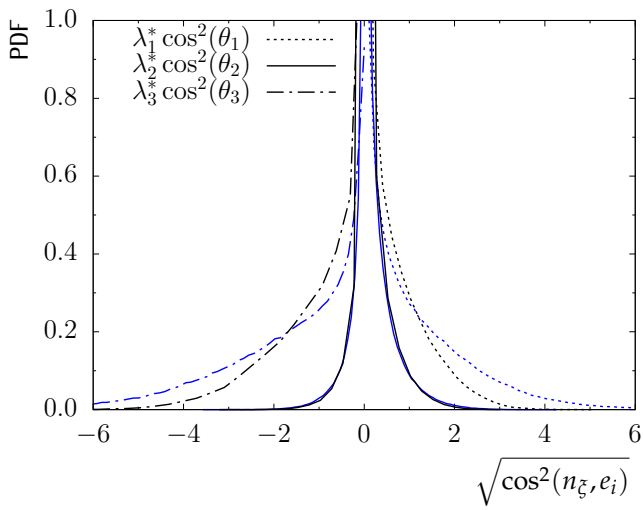


Figure 8.13. *PDFs de la contribution des termes $\lambda_i \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_i})$ dans le terme de TSI normalisé. $\lambda_1 \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$ (trait pointillé), $\lambda_2 \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_2})$ (trait continu), et e_{λ_3} (trait mixte) en amont (traits noirs) et en aval (traits bleus) pour le cas de références $M_1 =$ 1.7.*

La Figure 8.14 montre que, quelle que soit la valeur du nombre de Mach en amont du choc, les PDFs de Ψ sont déviées vers des valeurs négatives, indiquant ainsi que le terme d'interaction scalaire-turbulence TSI est un terme de production du taux de la dissipation scalaire SDR. Nous remarquons également que la distribution de Ψ est plus serrée autour de la valeur moyenne 0 en amont du choc qu'en aval du choc pour les trois valeurs de Mach. La variance du terme TSI (c'est-à-dire la variance de Ψ) est significativement augmentée en aval de l'onde de choc et cet effet s'affaiblit à mesure que la valeur du nombre de Mach diminue. Enfin, il faut souligner que ce terme est amélioré dans la région proche de l'onde de choc

où la déformation induite par l'écoulement compressible tend à augmenter les gradients de vitesse.

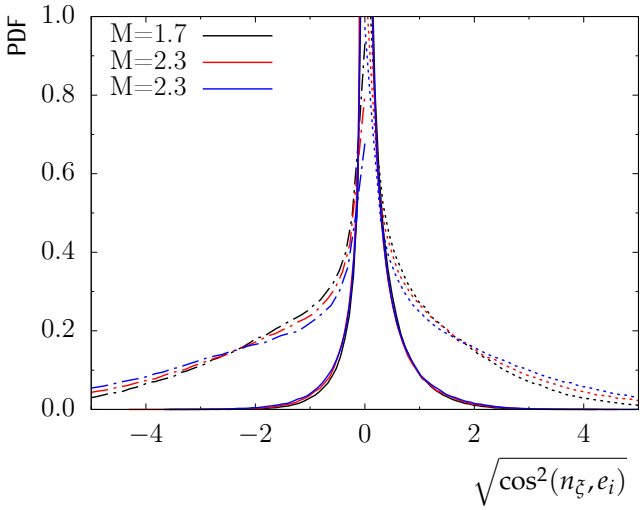


Figure 8.14. *Comparaison entre les PDFs de la contribution des termes $\lambda_i \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_i})$ dans le terme de TSI normalisé. $\lambda_1 \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_1})$ (trait pointillé), $\lambda_2 \cos^2(\boldsymbol{n_\xi}, \boldsymbol{e_2})$ (trait continu), et e_{λ_3} (trait mixte) en amont du choc références pour les trois Mach $M_1 = 1.7, 2.0$ et 2.3.*

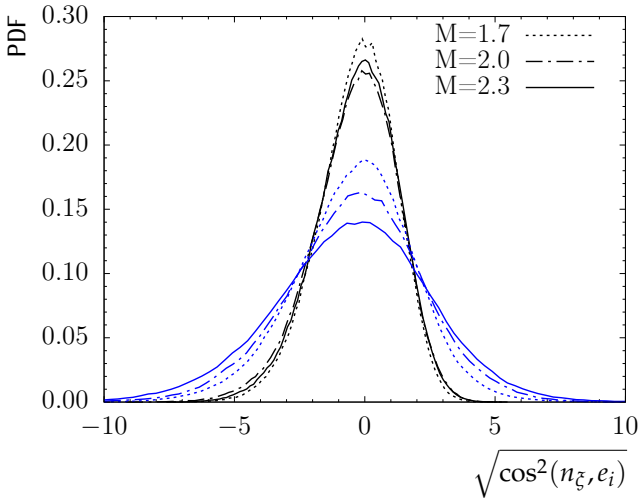


Figure 8.15. *PDFs de $\Psi = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \cos^2(\theta_i)$ en amont (traits noirs) et en aval (traits bleus) pour le cas de références $M_1 = 1.7$.*

8.4 Similitudes entre le vecteur de vorticité et le gradient scalaire

Nous examinons de plus près l'orientation entre le vecteur de vorticité et le gradient scalaire. Les statistiques correspondantes sont rapportées à la Figure 8.16. Les résultats obtenus en amont ou en aval de l'onde de choc sont compatibles avec la structure de lamelles scalaires étirées (nappes), qui sont alignées avec la direction principale la plus compressive e_3 mais perpendiculaire à la vorticité, au vecteur d'étirement $\mathcal{W}$ et à la direction principale intermédiaire e_2. La présence de l'onde de choc tend à améliorer cette tendance. Pour conclure avec cette analyse d'orientation, il convient de noter que la déformation et la vorticité interagissent, et les valeurs propres de la contrainte dépendent également des effets non locaux par l'influence de la pression, ce qui rend l'analyse plus complexe comme l'ont souligné récemment Gonzalez et Paranthoën (2011) [97].

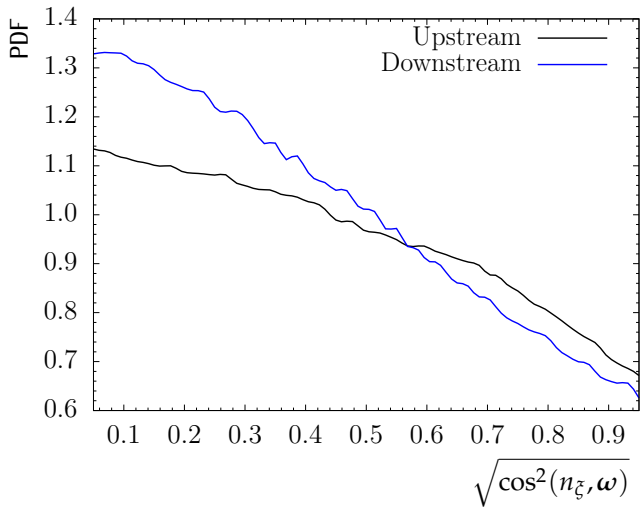
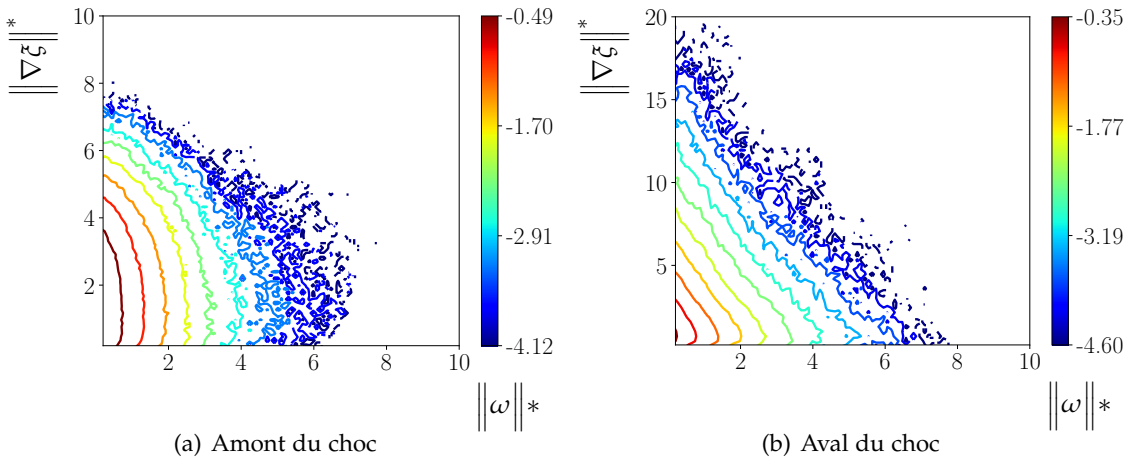


Figure 8.16. *PDFs de l'angle entre la vorticité et le gradient scalaire pour le cas de références $M_1 = 1.7$.*

Compte tenu des similitudes existant entre le terme TSI présent dans l'équation de transport du taux de dissipation scalaire TSI et le terme d'étirement agissant sur la norme de vorticité, c'est-à-dire le terme de production présent dans l'équation de transport d'enstrophie $\omega_i \mathcal{S}_{ij} \omega_j$, nous pourrons soupçonner qu'il existe une certaine corrélation entre les amplitudes de la vorticité et du scalaire passif. D'une part, étant donné que la vorticité est préférentiellement alignée avec la direction principale intermédiaire du tenseur de la déformation du $\mathcal{S}_{ij}$, tandis que le gradient scalaire est principalement aligné avec la direction principale la plus compressive, les deux vecteurs se révèlent préférentiellement orthogonaux l'un à l'autre (cf. Figure 8.16). D'autre part, comme le montre la Figure 8.17, la PDF jointe des amplitudes du gradient scalaire et de la vorticité, c'est-à-dire $P\left(\left\|\omega\right\|_*, \left\|\nabla\xi\right\|^*\right)$, est proche du produit des deux PDFs marginales $P\left(\left\|\omega\right\|_*\right)$ et $P\left(\left\|\nabla\xi\right\|^*\right)$, un comportement similaire à celui observé par Pumir (1994) [219] dans son travail sur le mélange scalaire dans un écoulement incompressible.



(a) Amont du choc (b) Aval du choc

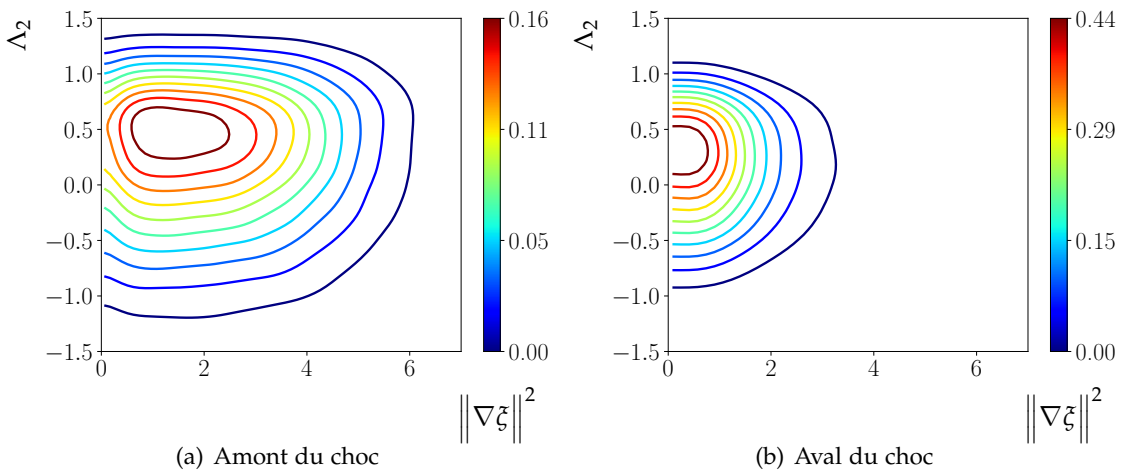
Figure 8.17. *la PDF joint des amplitudes du gradient scalaire et de la vorticité normalisées par leurs valeurs RMS*

8.5 Effets des statistiques de λ_2 sur le champ scalaire

L'influence de l'onde de choc sur le mélange scalaire est analysée plus en détail en considérant les statistiques de λ_2, qui, comme il a été mentionné dans la section §7.3.2, nous renseigne sur l'intensité du transfert turbulent. Nous considérons la valeur normalisée de λ_2, comme proposée par Ashurst *et al.* [6] et Lund et Rogers (1994) [172], définie par :

$$\Lambda_2 = \frac{\sqrt{6}\lambda_2}{\sqrt{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2}}. \tag{8.13}$$

La Figure 8.18 reporte la distribution de la PDF jointe de l'amplitude du gradient scalaire et Λ_2. Une première remarque que nous pouvons tirer de cette figure est que la valeur propre intermédiaire normalisée Λ_2 tend à être plus positive pour de grandes valeurs de $\left\|\nabla\xi\right\|$ et que la valeur moyenne de Λ_2 s'approche de 0.5. Cette observation est conforme aux résultats numériques de Ashurst *et al.* [6] et expérimentaux de Ganapathisubramani *et al.* [89] pour une THI. Cela suggère que les les régions de fort gradient où la dissipation est importante semblent posséder une préférence pour des valeurs positives de Λ_2, correspondants aux régions présentant de forts taux de dissipation scalaire, sont associées à des structures sous forme de nappes. Les statistiques sont modifiées par l'onde de choc et la PDF jointe obtenu en aval de l'onde de choc est plus arrondie et le maximum de Λ_2 a diminué en s'approchant de 0.35 Pour un écoulement incompressible, la valeur de Λ_2 doit être limitée par ± 1, par

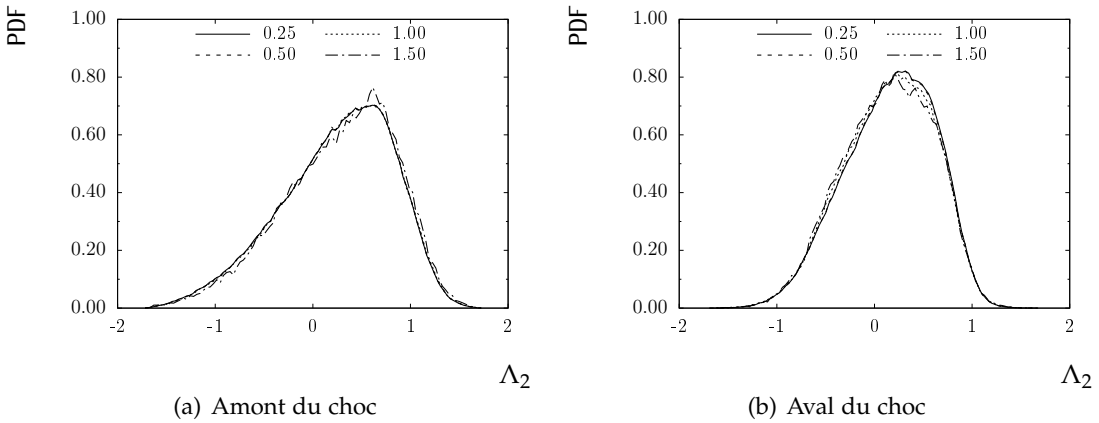


(a) Amont du choc (b) Aval du choc

Figure 8.18. *PDF jointe de l'amplitude du gradient scalaire et Λ_2*

définition (voir Betchov [15], Ashurst *et al.* [6] et Gomes-Fernandes *et al.* [94]). Cependant, la Figure 8.18 montre que la valeur de Λ_2 s'étend sur ± 1.4 ce qui s'explique par la compressibilité de l'écoulement.

Les relations entre l'amlitude du gradient scalaire (ou SDR) et Λ_2 peuvent être étudiées plus en détail en calculant la PDF conditionnelle de Λ_2. La Figure 8.19 affiche la PDF conditionnelle de Λ_2 pour différents seuils (0.25, 0.5, 1.0 et 1.5) de l'amplitude du gradient scalaire



(a) Amont du choc (b) Aval du choc

Figure 8.19. *PDF de Λ_2 conditionné sur l'amplitude de $\nabla\xi$ en amont (a) et en aval (b) du choc. Quatre seuils sont utilisés qui correspondent à* 0.25, 0.5, 1.0 *et* 1.5 $\|\nabla\xi\|/\overline{\|\nabla\xi\|}$

$\|\nabla\xi\|/\overline{\|\nabla\xi\|}$. Les PDFs conditionnelles obtenues ne présentent pas de différence remarquable, ce qui indique que les régions de mélange scalaire intense ne coïncident pas nécessairement avec des régions de Λ_2 intense que ce soit en amont ou en aval du choc. Ce comportement est conforme aux conclusions tirées d'analyses similaires effectuées sur la *PDF* jointe de la vorticité et de Λ_2 [89, 132].

8.6 Intermittence du champ scalaire

Nous nous intéressons à la statistique de la dissipation scalaire afin de mettre en évidence l'effet du choc normal sur la nature intermittente du champ dynamique sur le champ THI en amont. L'intermittence est définie comme étant une alternance des zones ayant des propriétés de comportement significativement différentes, i.e. des zones d'activité forte côtoyant des zones calmes. L'existence de ce phénomène a été pour la première fois souligné dans les travaux de Townsend (1980) [257]. L'auteur a mis en évidence expérimentalement l'existence d'une alternance non-régulière de zones d'écoulement présentant des valeurs très différentes du gradient de vitesse (dissipation d'énergie) et de concentration (dissipation scalaire).

Les distributions du taux de dissipation scalaire, calculées à partir des données DNS, sont analysées en coordonnées logarithmiques pour mettre en évidence le comportement de leur queue, et donc analyser les écarts à la loi log-normale. Des recherches similaires ont été effectuées en utilisant des données expérimentales par Markides et Mastorakos [179] ou numériques par Vedula *et al.* [265]. La distribution log-normale apparaît en effet comme une parabole en considérant la valeur de $\zeta = (\log\chi_\xi - \mu_{\log\chi_\xi})/\sigma_{\log\chi_\xi}$, où $\mu_{\log\chi_\xi}$ et $\sigma_{\log\chi_\xi}$ désignent respectivement la moyenne et la RMS de $\log\chi_\xi$. La PDF standardisée de ζ en amont et en aval de l'onde de choc est présentée sur la même figure. Comme prévu dans les études précédentes, nous trouvons que que la queue latérale basse (c'est-à-dire les valeurs négatives de ζ) affiche un taux de décroissance plus lent que celui de la distribution log-normale (la courbe est dite

"platikurtique", i.e. $\log \chi_\xi$ affiche un comportement super-gaussien), tandis que l'autre queue (i.e. les valeurs positives χ_ξ) décroît plus rapidement (la courbe est dite "leptokurtique", i.e. $\log \chi_\xi$ affiche un comportement sous-gaussien). La PDF correspondante est donc asymétrique.

Si l'on considère la PDF du logarithme de SDR, même si la "traîne" négative présente un taux de décroissance plus rapide en aval de l'onde de choc que celle observée en amont de l'onde de choc, elle ne présente pas de tendance évidente à une log-normalité accrue à mesure que la turbulence se développe. Finalement, d'après la Figure 8.20, il semble que le l'écart à l'anomalie logarithmique n'est que légèrement réduit à la traversée de l'onde de choc.

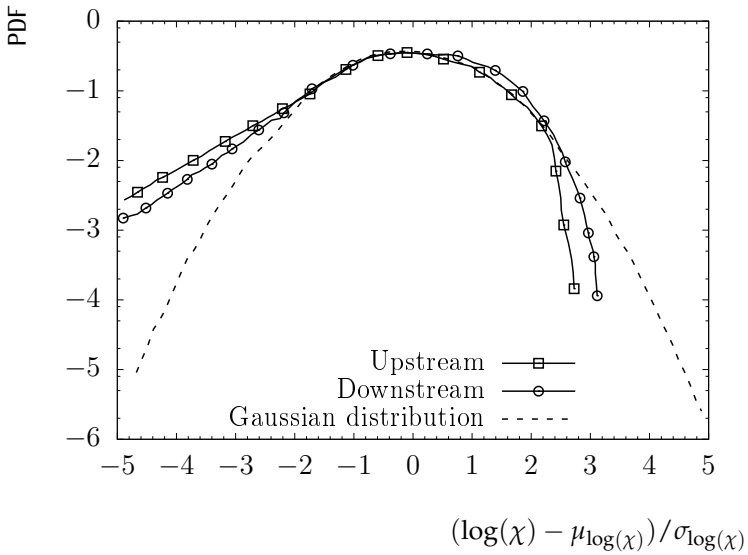


Figure 8.20. *PDF of* $(\log(\chi) - \mu_{\log(\chi)})/\sigma_{\log(\chi)}$

Récapitulatif

L'évolution spatiale de la variance scalaire et son taux de dissipation sont étudiés et comparés pour diverses valeurs de nombre de Mach pour le cas en présence et en absence du choc. L'interaction avec le choc se traduit par une intensification significative des processus de mélange scalaire et entraîne une atténuation de la turbulence scalaire, c'est-à-dire du niveau de variance scalaire. Ceci est démontré par le biais (i) des PDFs de l'alignement du gradient scalaire avec les directions principales du tenseur du taux de déformation qui sont significativement modifiés en aval direct du choc, (ii) d'une étude des échelles de longueurs qui montrent que l'interaction avec le choc s'accompagne également d'une diminution significative de l'échelle de longueur caractéristique des poches scalaires (micro-échelle scalaire de Taylor) ainsi que d'une croissance de l'anisotropie à petite échelle.

9

Impact de la viscosité volumique sur une couche de mélange impactée par choc

Mini-sommaire

9.1 Notion de viscosité volumique **169**
9.2 Propriétés générales des couches de mélange **172**
9.3 Caractéristiques du mélange étudié **174**
9.4 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas bidimensionnel . **176**
9.4.1 Cas inerte 178
9.4.2 Cas réactif 181
9.5 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas tridimensionnel . **189**
9.5.1 Comparaison qualitative 189
9.5.2 Comparaison quantitative 190

L'objectif de ce chapitre est l'étude de l'effet du coefficient de viscosité de volume κ sur le développement spatial de couches de mélange compressibles bidimensionnelles réactives impactées par choc oblique. Les propriétés des couches de mélanges sont rappelées en premier lieu, puis une description détaillée des paramètres de simulation est introduite avant d'aborder l'analyse et la discussion des résultats.

Les travaux présentés ici été présentés au congrés *ICCFD* en 2018 [29].

9.1 Notion de viscosité volumique

Comme cela a été présenté initialement dans la section §2.5.1, pour un fluide newtonien, la loi de comportement régissant la relation entre le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} et les vitesses de déformation s'exprime par la relation :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) + \kappa S_{kk} \delta_{ij}. \tag{9.1}$$

Nous rappelons également que le premier terme du second membre de l'équation (9.1) est déviatorique et symétrique, tandis que le deuxième terme représente les changements volumétriques. La viscosité volumique, appelée élégamment la viscosité de dilatation, de volume ou encore la seconde viscosité, est une constante de proportionnalité entre la partie isotrope de la contrainte visqueuse et le taux de dilatation. Le taux de dissipation visqueuse correspondant, noté Φ, comprenant à la fois les contributions de cisaillement et de dilatation, peut être écrit [160] :

$$\Phi = \tau_{ij} S_{ij} = 2\mu S_{ij}^{(\mathrm{d})} S_{ij}^{(\mathrm{d})} + \kappa \Delta^2, \tag{9.2}$$

où $S_{ij}^{(\mathrm{d})} = S_{ij} - \Delta\delta_{ij}/3$ est la partie déviatorique du tenseur de déformation et $\Delta = \partial u_k/\partial x_k$ le taux de dilatation. L'équation (9.2) indique que les deux paramètres importants pour évaluer l'importance de la viscosité volumique sur la dissipation de l'énergie cinétique turbulente sont le rapport κ/μ, et le rapport entre les carrés des taux de dilatation et de déformation du tenseur déviatorique, i.e. $\Delta^2/S_{ij}^{(\mathrm{d})}S_{ij}^{(\mathrm{d})}$. Le premier dépend de l'écoulement considéré, tandis que le second est un résultat de la simulation numérique. Comme l'ont noté Graves et Argrow (1999) [101], la viscosité volumique est systématiquement mise à zéro dans diverses études de mécanique des fluides en invoquant l'hypothèse de Stokes [249]. Cette hypothèse est bien justifiée si $\kappa = 0$ ou/et $\Delta = 0$. Seuls les gaz monoatomiques dilués ont une viscosité volumique nulle. Pour les gaz polyatomiques, les mesures expérimentales indiquent que la viscosité volumique peut être sensiblement supérieure à celle de la viscosité de cisaillement (voir Tableau 9.1). Pour le CO_2, il peut être plusieurs milliers de fois plus grand, auquel cas le rôle des pertes dues à la dilatation peuvent être grands, en fonction de l'importance relative des déformations volumétriques à déviatorique. Bien que la dissipation de la dilatation soit souvent faible par rapport à son homologue de cisaillement dans les écoulements faiblement compressibles, de nombreuses études soulignent l'importance des effets dilatationels dans l'analyse et la modélisation de la turbulence compressible [236, 144, 214].

Tableau 9.1 – *Mésure expérimentale du rapport κ/μ pour les espèces N_2, CO_2, CO, H_2, CH_4 et O_2 à la température* 300 (K) *[256, 17, 54, 116, 218, 217].*

Espèces	N_2	CO	H_2	CH_4	O_2	CO_2
κ/μ	0.73	0.55	33.4	1.33	0.5	1000 – 3500

Les effets de dilatation et de la viscosité volumique κ peuvent être illustrés en décomposant le tenseur de contraintes (total) σ_{ij} en une partie isotrope et une autre déviatorique :

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + 2\mu S_{ij}^{\mathrm{d}} + \kappa\Delta\delta_{ij}, \tag{9.3}$$

où P est la pression statique du gaz au repos dans les mêmes conditions thermodynamiques (c'est-à-dire la même composition, densité, température et énergie interne). La pression mécanique, $\overline{P} = -\sigma_{ii}/3$, peut alors être exprimée comme suit :

$$\overline{P} = P - \kappa\Delta. \tag{9.4}$$

En présence de fortes variations de densité produites par l'écoulement, la pression mécanique

$\overline{P}$ s'écarte de la pression thermodynamique P correspondant aux conditions de l'équilibre thermodynamique local. La pression mécanique correspond à l'énergie de translation des molécules, alors que la pression thermodynamique est une mesure de l'énergie totale et comprend des degrés de liberté internes (vibratoires et rotationnels), en plus de la translation. Lorsque l'écoulement produit des changements rapides de l'état thermodynamique, le fluide n'est plus en équilibre, ce qui déclenche des processus internes au sein du fluide tachant à le conduire vers l'état d'équilibre [151] ; dans le cas des gaz polyatomiques dilués par exemple, ces processus sont causés par des collisions inélastiques entre des degrés de liberté internes [55, 271, 72]. L'écart entre les pressions mécaniques et thermodynamiques est une conséquence directe d'un processus de relaxation cherchant à atteindre l'équipartition de l'énergie. Cette relaxation entraîne une réduction de la pression mécanique dans un écoulement en expansion ($\overline{P} < P$ et pour lequel $\Delta > 0$) et une augmentation de la pression mécanique sous compression ($\overline{P} > P$ et pour lequel $\Delta < 0$). En d'autres termes, la viscosité volumique est une description du transfert d'énergie hors équilibre entre les degrés de liberté translationnels et internes (vibration et rotation). Il s'ensuit en outre que la contribution de la partie isotrope du tenseur des contraintes s'exprime par unité de volume comme [13] :

$$-\overline{P}\Delta = -P\Delta + \kappa\Delta^2. \tag{9.5}$$

Le premier terme du côté droit est un travail (réversible) effectué par la pression thermodynamique. Le second terme, identique à (9.2), est positif et représente la dissipation d'énergie mécanique. Les équations (9.4) et (9.5) montrent que la viscosité volumique est une construction continue tentant de décrire des phénomènes de relaxation complexes se produisant au niveau moléculaire en contribuant à dissiper l'énergie par des mouvements volumétriques.

L'incorporation de la viscosité volumique dans les équations de Navier-Stokes n'est valable que pour les petites déviations de l'équilibre thermodynamique local ETL [271]. Pour les gaz ayant un grand rapport κ/μ, l'échelle de temps hors équilibre caractéristique est de l'ordre de quelques microsecondes [146] à température ambiante, de sorte que l'approximation ETL est une approximation valable pour de nombreux problèmes. Pour les écoulements manifestant des grands écarts par rapport à ETL, le transfert d'énergie entre les modes doit être traité en utilisant des approches plus sophistiquées, par exemple ils imposent le recours aux équations hors équilibre [101]. Bien que des estimations numériques puissent être faites pour κ [54], les mesures expérimentales quantitatives restent encore très difficiles [72]. Les tentatives de mesure de la viscosité volumique sont souvent effectuées en se basant sur des mesures d'absorption acoustique d'une onde sonore, initiées principalement des les années 1970 par le groupe du Professeur J.J.M. Beenakker [116, 218, 217]. le lecteur doit se référer à l'article de Billet *et al.* [17] pour plus de détails quant à la façon de mesurer la viscosité volumique par voie acoustique.

L'influence de la viscosité volumique de masse sur la dynamique des fluides a été étudiée dans le contexte de certaines applications d'ingénierie. Le chauffage aérodynamique pendant l'entrée d'un véhicule sur Mars, où l'atmosphère est principalement constituée de dioxyde de

carbone, fournit une motivation pour comprendre les écoulements dans lesquels la viscosité volumique est importante [72]. Les premières études de Emanuel (1992) [73] et Gonzalez et Emanuel (1993) [95] ont évalué les effets de la viscosité volumique sur le transfert de chaleur dans les écoulements laminaires de Couette et les couches limites hypersoniques. En écoulement réactif, Billet *et al.* (2008) [17] ont simulé numériquement l'interaction d'un choc plan avec une bulle d'hydrogène ; ils ont trouvé que les caractéristiques d'écoulement telles que les gradients de pression et la production de vorticité baroclinique dépendent sensiblement de κ. Fru *et al.* (2011) [86] ont de plus démontré, en utilisant la simulation numérique directe, que les flammes laminaires montrent peu de sensibilité à κ, mais que la turbulence amplifie les petites différences instantanées provenant des effets visqueux de κ. Bahmani et Cramer (2014) [9] ont simulé une interaction choc-couche limite bidimensionnelle en faisant varier la valeur numérique de κ. Ils ont constaté que la séparation induite par le choc est supprimée dans les calculs avec une viscosité apparente due à l'épaississement du choc incident puis à la réduction subséquente de l'amplitude du gradient de pression. Au nombre de Reynolds élevé, la viscosité volumique donne lieu à une variation de la pression thermodynamique à travers la couche limite via des termes sources dans l'équation d'énergie [9]. Les dernières années ont vu l'émergence de schémas cinétiques gazeux [162, 148], par le biais desquels la dissipation due à la viscosité volumique est prise en compte pour simuler la turbulence compressible. Dans une étude spécifique de la viscosité volumique à l'aide des schémas cinétiques gazeux, Liao *et al.* (2009) [162] ont constaté que la dissipation de la dilatation est augmentée lorsque la viscosité volumique est incluse, et que le coefficient d'asymétrie et d'aplatissement sont modifiées à des nombres de Mach turbulents de 0.5, bien que les mécanismes détaillés ne soient pas entièrement expliqués.

9.2 Propriétés générales des couches de mélange

La figure 9.1 schématise la géométrie d'une couche cisaillée développée spatialement à partir de deux écoulements parallèles. Dans le sillage de la plaque séparatrice, le profil de

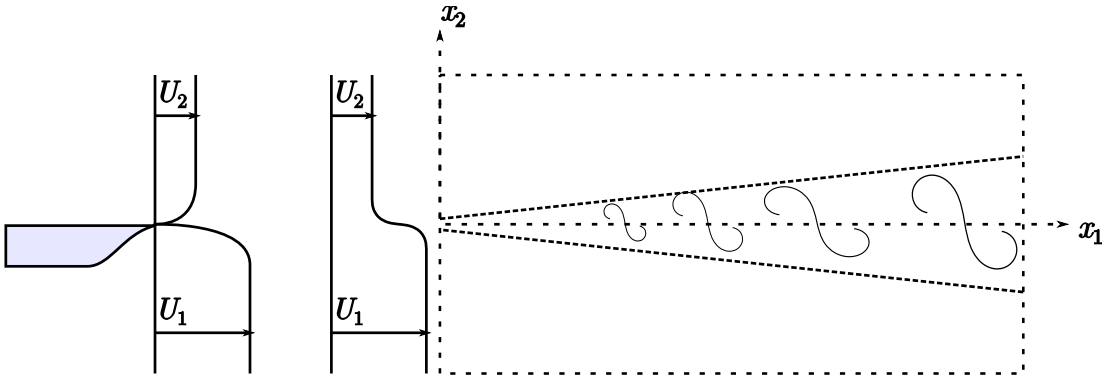


Figure 9.1. *Schéma du développement spatial de la couche cisaillée dans le sillage d'une plaque séparatrice.*

vitesse longitudinale de la couche cisaillée est souvent modélisé par un profil en tangente

hyperbolique [21, 203, 238, 247] :

$$u_1 = \frac{U_1 + U_2}{2} + \frac{U_1 - U_2}{2} \tanh\left(\frac{2x_2}{\delta_{\omega,0}}\right), \tag{9.6}$$

où U_1 est la vitesse de l'écoulement rapide et U_2 celle de l'écoulement lent ($U_1 > U_2$). La variable $\delta_{\omega,0}$ fait référence à l'épaisseur de vorticité *initiale* de la couche de mélange. Cette épaisseur est calculée à partir de la relation :

$$\delta_\omega = \frac{U_1 - U_2}{|\partial \widetilde{u_1}/\partial x_2|_{\max}}. \tag{9.7}$$

Dans ce chapitre, la valeur moyenne au sens de Reynolds d'une quantité instantanée quelconque ϑ s'obtient avec la relation :

$$\overline{\vartheta}(x_1, x_2, x_3) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \vartheta(x_1, x_2, x_3, t)\mathrm{d}t}{\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t}, \tag{9.8}$$

et la valeur moyenne au sens de Favre s'écrit :

$$\widetilde{\vartheta}(x_1, x_2, x_3) = \frac{\int_{t_i}^{t_f} \rho\vartheta(x_1, x_2, x_3, t)\mathrm{d}t}{\int_{t_i}^{t_f} \rho(x_1, x_2, x_3, t)\mathrm{d}t}, \tag{9.9}$$

avec t_i et t_f le temps initial et final de la prise de donnés dans la base statistique. L'épaisseur de vorticité peut présenter une allure irrégulière dûe au terme de dérivation du dénominateur et la définition d'épaisseur de quantité de mouvement est d'autant plus utilisée dans la littérature :

$$\delta_\theta = \frac{1}{\rho_0 \Delta U^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\rho}(U_1 - \widetilde{u_1})(\widetilde{u_1} - U_2)\mathrm{d}x_2, \tag{9.10}$$

où ρ_0 est la masse volumique moyenne des deux écoulements parallèles en entrée. Les définitions (9.7) et (9.10) s'utilisent comme longueurs caractéristiques de la couche cisaillée, $\Delta U = U_1 - U_2$ s'utilise comme vitesse de référence et ρ_0 comme masse volumique de référence. Dans le cas où le profil de vitesse longitudinale est donné par la relation (9.6), *i.e.* tangente hyperbolique, les épaisseurs initiales vérifient la relation $\delta_{\omega,0} = 4\delta_{\theta,0}$.

Le taux de croissance de l'épaisseur de vorticité d'une couche de mélange *spatiale* est donné par :

$$\delta'_\omega = \frac{1}{\eta}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}x_1}, \tag{9.11}$$

avec $\eta = (U_1 - U_2)/(U_1 + U_2)$. Pour les simulations basées sur l'approximation d'un développement temporel des couches de mélange, ce taux de croissance est défini autrement comme :

$$\delta'_{\omega,t} = \frac{1}{\Delta U}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}t} = \frac{4}{\delta_{\omega,0}}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}\tau}, \tag{9.12}$$

avec $\tau = 4\Delta U t/\delta_{\omega,0}$. En admettant que $U_c = (U_1 + U_2)/2$, ces relations vérifient :

$$\delta'_\omega = \frac{1}{\eta}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}x_1} = \frac{1}{\eta}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x_1}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}t} = \frac{2}{\Delta U}\frac{\mathrm{d}\delta_\omega}{\mathrm{d}t} = 2\delta'_{\omega,t}. \tag{9.13}$$

Le même raisonnement peut être appliqué à la définition du taux de croissance de l'épaisseur de quantité de mouvement.

Le nombre de Reynolds basé sur l'épaisseur de vorticité est défini par :

$$Re_\omega = \frac{\rho_0 \Delta U \delta_\omega}{\mu_0}, \tag{9.14}$$

où la valeur moyenne de la viscosité dynamique en entrée est prise en compte. Les définitions du nombre de Reynolds et de l'épaisseur caractéristique sont utilisées pour dimensionner la couche de mélange.

9.3 Caractéristiques du mélange étudié

La composition du mélange étudié s'appuie sur des études expérimentales et numériques portant sur des systèmes de propulsion à haute vitesse [49, 187, 238], *e.g.* moteurs ramjet et scramjet. Nous considérons une configuration légèrement différente de celle de Miller *et al.* [187], synthétisée dans le Tableau 9.2. Tel que cela a été suggéré dans [187], l'influence des radicaux présents dans le courant d'oxydant (air vicié) n'est pas négligeable et doit être prise en compte pour les simulations numériques avec chimie détaillée. Pour ce faire, des calculs d'équilibre ont été conduits à l'aide de la librairie `CHEMKIN` [141]. Ces calculs permettent de déterminer la composition, la température adiabatique ainsi que le temps d'auto-inflammation d'un mélange donné à l'équilibre chimique. A partir des données expérimentales mesurées par Miller *et al.* [187], il est possible de calculer les fractions massiques de radicaux à l'équilibre chimique. Des valeurs approximatives de ces quantités ont été reportées dans le Tableau 9.2.

***Tableau 9.2** – Configuration du mélange retenu pour les couches cisaillées inertes et réactives.*

Quantité	Combustible	Oxydant
Pression (Pa)	94232.25	94232.25
Température (K)	545.0	1475.0
M. vol. (kg/m^3)	0.354	0.203
Y_{H_2} (−)	0.05	0.0
Y_{O_2} (−)	0.0	0.278
Y_{H_2O} (−)	0.0	0.17
Y_H (−)	0.0	$5.60 \cdot 10^{-7}$
Y_O (−)	0.0	$1.55 \cdot 10^{-4}$
Y_{OH} (−)	0.0	$1.83 \cdot 10^{-3}$
Y_{HO_2} (−)	0.0	$2.50 \cdot 10^{-7}$
Y_{N_2} (−)	0.95	0.55

La Figure 9.2(a) montre la température adiabatique d'équilibre en fonction de la fraction

de mélange :

$$z = \frac{1}{1+\phi}\left(\phi\frac{Y_C}{Y_{C,c}} - \frac{Y_O}{Y_{O,o}} + 1\right), \tag{9.15}$$

où Y_C et Y_O sont les fractions massiques de combustible et d'oxydant, respectivement. La quantité $Y_{C,c}$ est la fraction massique de combustible du côté de combustible tandis que $Y_{O,o}$ désigne la même quantité se référant à l'oxydant. Le rapport d'équivalence ϕ est défini comme :

$$\phi = \frac{\nu_O W_O}{\nu_C W_C}\frac{Y_{C,c}}{Y_{O,o}}. \tag{9.16}$$

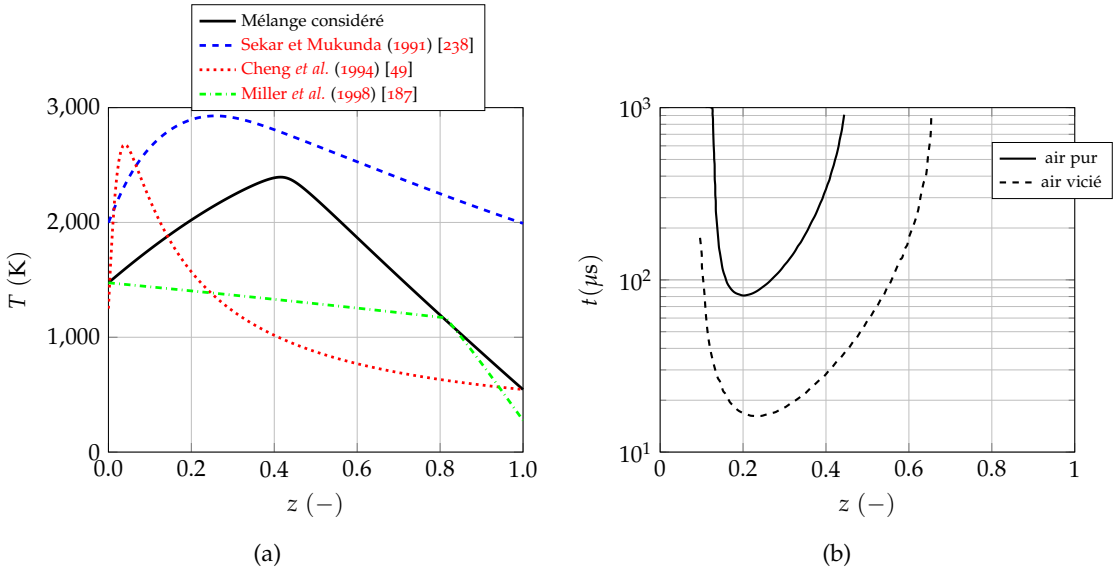


Figure 9.2. *(a) Température adiabatique du mélange et (b) temps d'auto-inflammation en fonction de la fraction de mélange correspondant au mélange considéré et autres mélanges reportés dans la littérature.*

La température adiabatique d'équilibre pour la configuration de mélange retenue dans ce travail est comparée à différents mélanges utilisés dans la littérature [187, 49, 238]. Cette température, correspondant au taux maximum de dégagement de chaleur, s'utilise comme une estimation des niveaux de température maximum attendus dans la couche de mélange. Dans la configuration de Miller *et al.* [187], la température adiabatique d'équilibre reste inférieure à celle de l'air vicié ($z = 0$), ce qui explique les résultats observés par les auteurs, discutés ci-dessus. Dans la configuration expérimentale de Cheng *et al.* [49], les effets dus à la combustion sont relativement importants, élevant la température jusqu'à 2700 K près de la stœchiométrie ($z_{st} = 0.41$). Finalement, la courbe correspondant à la simulation numérique effectuée par Sekar et Mukunda [238] montre des effets encore plus importants. La courbe correspondant à la configuration retenue dans ce travail se situe dans une région intermédiaire. Cette configuration est obtenue en utilisant les mêmes compositions que Miller *et al.* [187] et la même température de l'écoulement d'air vicié ($z = 0$). Du côté combustible ($z = 1$), la température de 545 K correspond à celle mesurée par Cheng *et al.* [49] tandis que la fraction massique d'hydrogène est réduite de moitié par rapport à la configuration de Miller *et al.* [187]. Ce choix permet d'obtenir une température maximale adiabatique de mélange suffisamment

élevée pour produire des changements significatifs aux grandes échelles tout en utilisant une gamme de valeurs de composition et température compatibles avec les bancs d'essais actuels.

La Figure 9.2(b) montre les temps d'auto-inflammation attendus dans la configuration de mélange retenue pour les deux schémas cinétiques mentionnés auparavant. Les calculs sont effectués avec le mécanisme de Ó Conaire *et al.* [198], constitué de 21 réactions élémentaires et 9 espèces (voir Tableau 9.3). L'effet de la présence de radicaux (air vicié) dans l'écoulement d'oxydant diminue le temps d'auto-inflammation et augmente l'étendue de la zone inflammable. Par conséquent, les simulations numériques réactives conduites sans prendre en compte la présence de radicaux (air pur) s'avèrent très coûteuses, voir irréalisables, car les dimensions du domaine de calcul nécessaires pour atteindre des conditions propices à l'auto-allumage du mélange seront exagérément importantes.

Tableau 9.3 – *Mécanisme réactionnel de Ó Conaire et al. [198]. Les coefficients de réaction sont exprimés sous la forme* $k_f = AT^{\beta}\exp\left(-E_A/RT\right)$ *en unités s-cm^3-cal-mol-K. Les espèces considérées sont les suivantes :* H_2, O_2, H, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, N_2.

Nb.	Réaction	A	b	E_0
01	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	$1.91 \cdot 10^{14}$	0.00	16440
02	$O + H_2 \rightleftharpoons H + OH$	$5.08 \cdot 10^{4}$	2.67	6292
03	$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	$2.16 \cdot 10^{8}$	1.51	3430
04	$O + H_2O \rightleftharpoons 2OH$	$2.97 \cdot 10^{6}$	2.02	13400
05	$H_2 + M \rightleftharpoons 2H + M^a$	$4.58 \cdot 10^{19}$	−1.40	104400
06	$O_2 + M \rightleftharpoons 2O + M^a$	$4.52 \cdot 10^{17}$	−0.60	118900
07	$OH + M \rightleftharpoons O + H + M^a$	$9.88 \cdot 10^{17}$	−0.70	102100
08	$H_2O + M \rightleftharpoons H + OH + M^b$	$1.91 \cdot 10^{23}$	−1.80	118500
09	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M^c$	$1.48 \cdot 10^{12}$	0.60	0
10	$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$	$1.66 \cdot 10^{13}$	0.00	823
11	$HO_2 + H \rightleftharpoons 2OH$	$7.08 \cdot 10^{13}$	0.00	295
12	$HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$	$3.25 \cdot 10^{13}$	0.00	0
13	$HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	$2.89 \cdot 10^{13}$	0.00	−497
14	$H_2O_2 + O_2 \rightleftharpoons 2HO_2$	$4.63 \cdot 10^{16}$	−0.30	50670
15	$H_2O_2 + O_2 \rightleftharpoons 2HO_2$	$1.43 \cdot 10^{13}$	−0.30	37060
16	$H_2O_2 + M \rightleftharpoons 2OH + M^a$	$2.95 \cdot 10^{14}$	0.00	48430
17	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2O + OH$	$2.41 \cdot 10^{13}$	0.00	3970
18	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons H_2 + HO_2$	$6.03 \cdot 10^{13}$	0.00	7950
19	$H_2O_2 + O \rightleftharpoons OH + HO_2$	$9.55 \cdot 10^{6}$	2.00	3970
20	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	$1.00 \cdot 10^{12}$	0.00	0
21	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	$1.07 \cdot 10^{13}$	0.60	40450

[a]Efficacité du troisième corps : $k(H_2) = 2.50$, $k(H_2O) = 12$.
[b]Efficacité du troisième corps : $k(H_2) = 0.73$, $k(H_2O) = 12$.
[c]Efficacité du troisième corps : $k(H_2) = 1.30$, $k(H_2O) = 14$.

9.4 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas bidimensionnel

Cette section présente le développement spatial des couches de mélange compressibles bidimensionnelles réactives impactées par un choc oblique. Le schéma considéré est illustré

dans la Figure 9.3. Les caractéristiques de la couche de mélange et les paramètres géométriques de la simulations sont fournis dans les Tableau 9.4 et Tableau 9.5.

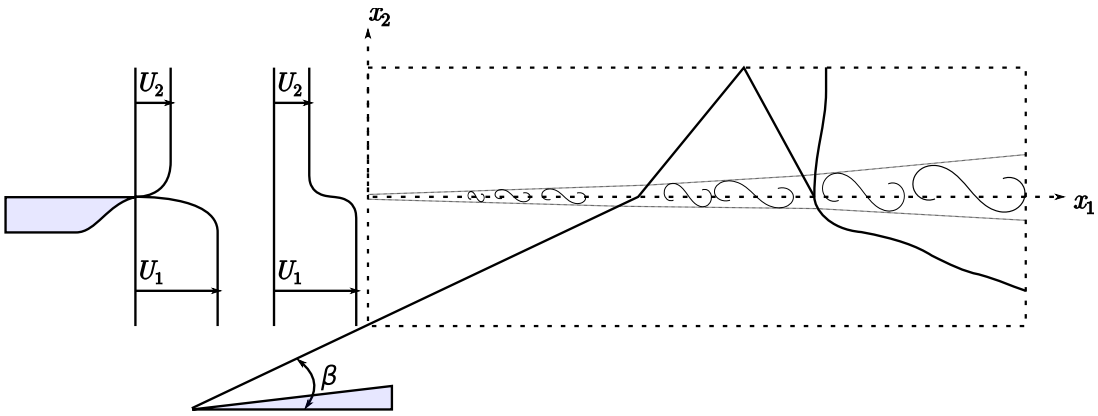


Figure 9.3. *Schéma du développement d'une couche cisaillée impactée par une onde de choc oblique.*

Tableau 9.4 *– Paramètres de simulation de la couche de mélange impactée par choc oblique. L'indice 1 correspond à l'injection d'oxydant et l'indice 2 correspond à l'injection de combustible.*

Quantité	U_1 (m/s)	M_1 (−)	U_2 (m/s)	M_2 (−)	r (−)	s (−)	η (−)	$\delta_{\omega,0}$ (m)
Valeur	1634.0	2.1	973.0	1.6	0.60	1.74	0.25	$1.44{\cdot}10^{-4}$

Tableau 9.5 *– Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2$ et il est discrétisé uniformément à l'aide d'un nombre de points $N = N_1 \times N_2$. L'épaisseur de vorticité initiale $\delta_{\omega,0}$, utilisée comme longueur de référence, est calculé à partir de $Re_{\omega,0} = 640$.*

$L_1/\delta_{\omega,0}$	$L_2/\delta_{\omega,0}$	N_1	N_2	N
275	120	1650	720	1188×10^3

À l'entrée du domaine, une condition de type Dirichlet est imposée et une condition non réfléchissante est employée en sortie. Sur la limite supérieure du domaine de calcul, une condition de paroi non glissante est utilisée. Au niveau de la partie inférieure du domaine, une condition de type Dirichlet est appliquée. Cette condition est obtenue par le biais des relations de Rankine-Hugoniot généralisées pour un mélange multi-espèce, avec un angle d'inclinaison $\beta = 33°$ par rapport à la direction de l'écoulement d'entrée non perturbé. Afin de produire le déclenchement des instabilités du type Kelvin-Helmholtz, une perturbation aléatoire

$$v_p = \varepsilon \alpha U_c \exp\left(-\frac{(x_1 - x_{1,0})^2 + (x_2 - x_{2,0})^2}{\Delta x_0^2}\right), \tag{9.17}$$

est appliquée à la composante de vitesse transversale en $(x_{1,0}, x_{2,0}) = (4\delta_{\omega,0}, 0)$. La quantité ε désigne un nombre aléatoire compris entre -1 et $+1$, α et Δx_0 sont, respectivement, l'amplitude et la taille de la perturbation. Dans cette simulation $\alpha = 2 \times 10^{-3}$, $\Delta x_0 = \delta_{\omega,0}$ [1] et $\varepsilon = 0.0001$. D'après Bogey [21], ce type d'excitation vise à déclencher le développement

1. Dans le cas inerte, $\Delta x_0 = \delta_{\theta,0}$. En sachant que $\delta_{\omega,0} > \delta_{\theta,0}$, nous avons besoin d'une valeur de Δx_0 plus grande pour exciter les modes externes les plus instables qui se trouvent loin du centre de la couche cisaillée

naturel de la couche de mélange. Stanley et Sarkar [247] ont effectué une étude de l'influence des différentes excitations sur le développement de la couche de mélange. Certains types de forçages provoquent un déclenchement anticipé des instabilités par rapport à une perturbation aléatoire, *i.e.* bruit blanc. Ces perturbations contribuent à augmenter de façon *artificielle* le taux de croissance de la couche de mélange pendant les premières étapes de développement et, après une certaine distance, la pente du taux de croissance se relaxe pour atteindre des valeurs plus proches de celles obtenues avec une perturbation aléatoire. Les simulations présentées dans ce travail utilisent uniquement un forçage aléatoire.

La valeur de la viscosité volumique utilisée dans le calcul est celle du mélange. La Figure 9.4 montre le champ moyenné du rapport $\widetilde{\kappa}/\widetilde{\mu}$, ce rapport dans la région de mélange est de l'ordre de ≈ 7.5. Il reste relativement modéré par rapport aux valeurs qui peuvent être rencontrées en pratique.

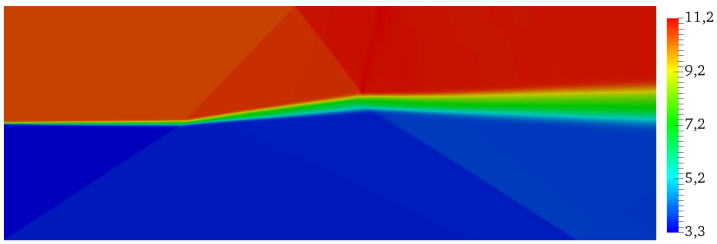


Figure 9.4. *Champ moyenné du rapport $\widetilde{\kappa}/\widetilde{\mu}$ pour le cas où la viscosité volumique est prise en compte.*

9.4.1 Cas inerte

La comparaison entre le cas, où dans la simulation, le calcul de la viscosité volumique est considéré (il sera noté par la suite $\kappa \neq 0$) et le cas où il est désactivé (il sera noté ci-après $\kappa = 0$) est, dans un premier temps, effectuée quand la cinétique chimique n'est pas pris en compte. Ceci à revient à annuler le taux de réaction volumique de chaque espèce. Sur la Figure 9.5 on peut remarquer que dans la couche de mélange le rapport κ/μ atteint des valeurs supérieures à l'unité. Ainsi, le taux de déformation du tenseur déviatorique peut avoir un effet sur le développement, au moins, instantané de la couche de mélange. On se propose dans cette section d'étudier dans quel mesure la viscosité volumique affectera les caractéristiques instantanées et statistiques de la couche de mélange.

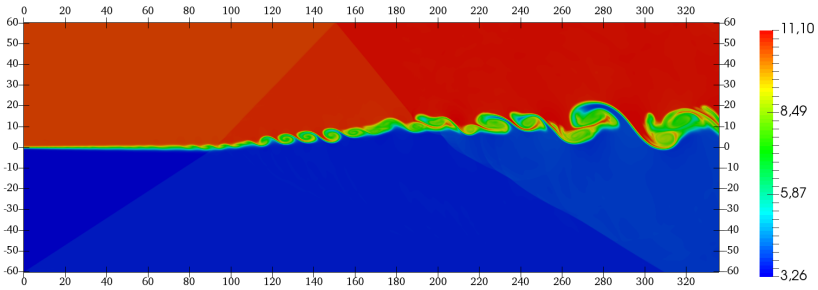
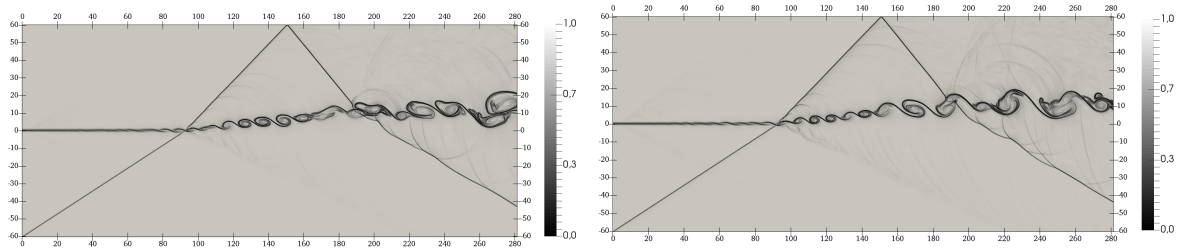


Figure 9.5. *Champ instantané du rapport κ/μ pour le cas où la viscosité volumique est prise en compte.*

La Figure 9.6 présente un *Schlieren* de masse volumique pour les deux simulations au même instant physique ($t\Delta U/L_1 = 75$ pour toutes les simulations bidimensionnelles). On

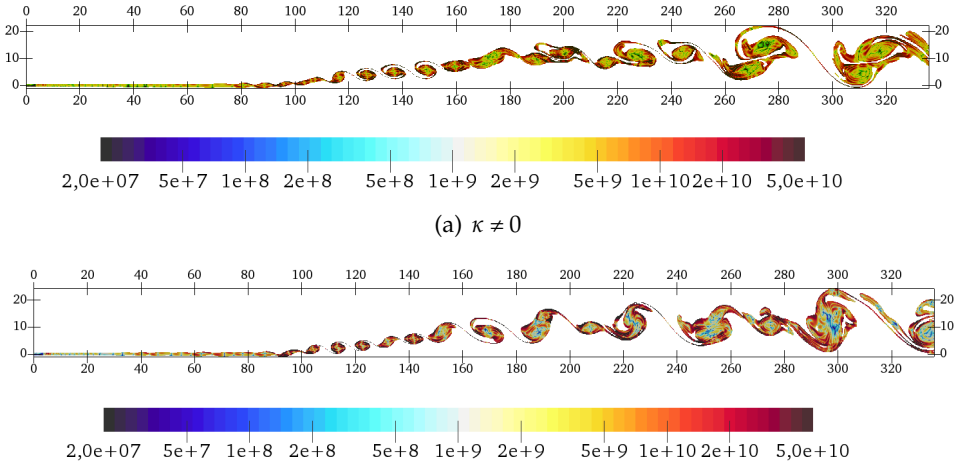


(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

Figure 9.6. *Champ instantané d'un Schlieren de masse volumique*

y observe que l'appariement des tourbillons commence à se produire plus tôt juste après le premier choc ($x_1/\delta_{\omega,0} \approx 111$ pour le cas $\kappa = 0$ et $x_1/\delta_{\omega,0} \approx 120$ pour le cas $\kappa \neq 0$. Dans la suite, on notera les coordonnées spatiales adimensionalisées $\eta_1 = x_1/\delta_{\omega,0}$ et $\eta_2 = x_2/\delta_{\omega,0}$). Cela peut s'expliquer par le même argument que Billet *et al.* [17] qui ont étudié l'effet du choc sur l'advection d'une bulle d'hydrogène, à savoir que l'absence de la viscosité fait que le terme barocline $\boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} \rho / \rho^2$ est plus grand à la traversée du choc, et donc il crée plus d'activité tourbillonnaire, ce qui mène à leur apparition de façon prématurée comparé au cas avec viscosité volumique qui tend à mieux aligner les gradients de pression avec ceux de masse volumique.

La Figure 9.7 présente, au même instant que pour les champs précédents, la zone de mélange caractérisée par $\mathcal{Z} \in [0.05, 0.95]$ et colorée par l'amplitude de $(\partial\rho/\partial x_i)(\partial P/\partial x_j)$. La définition du scalaire passif $\mathcal{Z}$ sera détaillée ultérieurement dans ce chapitre. La magnitude des deux champs est mise à la même échelle pour pourvoir les comparer. On remarque que le terme $\|\boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} \rho\|$ prend de grandes valeurs sur les extrémités des tourbillons où le gradient de pression et celui de la masse volumique sont significativement non-alignés, contribuant ainsi à la création des tourbillons et au développement de la couche de mélange.



(a) $\kappa \neq 0$

(b) $\kappa = 0$

Figure 9.7. *Champ instantané de la zone de mélange caractérisé par $\mathcal{Z} \in [0.05, 0.95]$ et coloré par la magnitude de $\boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} \rho$*

Pour quantifier la production associée au terme barocline avec et sans prise en compte de la viscosité volumique, on reporte sur la Figure 9.8 la PDF jointe du scalaire passif $\mathcal{Z}$ et $\|\boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} \rho\|$ pour les deux cas. L'absence de la viscosité volumique a tendance à favoriser le terme barocline, et cette production est plus concentrée autour de la valeur stœchiométrique $\mathcal{Z}_{\text{st}} = 0.43$.

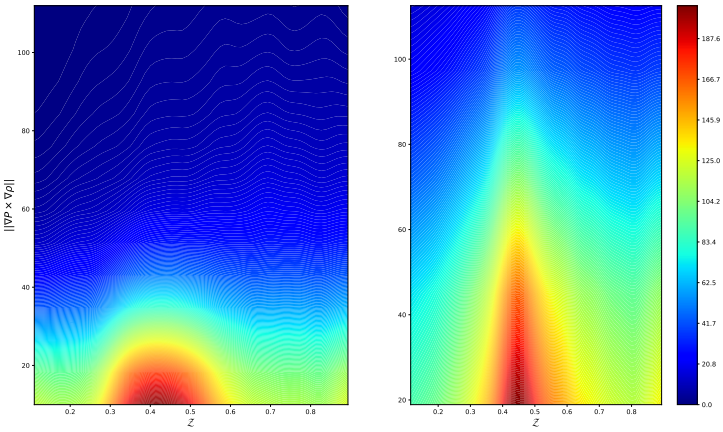


Figure 9.8. *PDF jointe de $\mathcal{Z}$ et $\|\boldsymbol{\nabla} P \times \boldsymbol{\nabla} \rho\|$ pour le cas $\kappa \neq 0$ à gauche et le cas $\kappa = 0$ à droite.*

Ces différentes observations nous montrent que la prise en compte ou non des effets de la viscosité volumique sur le développement instantané de la couche de mélange change la structure topologique de l'écoulement et l'appariement des tourbillons. Nous allons maintenant quantifier les différences que peut induire la viscosité volumique sur certaines quantités statistiques. Sur la Figure 9.6 on peut remarquer que l'absence de la viscosité volumique génère plus de réflexions parasites qui viendraient perturber le champ acoustique. Ceci peut s'expliquer par la présence de tourbillons parasites qui résultent du fait que la couche cisaillée est sous résolue entre deux structures tourbillonnaires successives. Cet étirement est associé à une divergence numérique non nulle aux deux points intermédiaires où se forment les tourbillons parasites. On peut ainsi stipuler que la prise en compte de la viscosité volumique permet d'éviter la formation de tourbillons parasites et l'apparition d'ondes parasites.

La couche de mélange se développe en espace, et son épaisseur peut être quantifiée par l'épaisseur de vorticité δ_ω définie dans l'équation (9.7). Cette épaisseur est une mesure de l'échelle caractéristique suivant laquelle le profil de vitesse moyen $U(x_2)$ présente un gradient. La Figure 9.9 montre l'évolution spatiale des épaisseurs de vorticité normalisées pour les deux simulations. Avant l'interaction avec le premier choc, l'évolution de l'épaisseur de vorticité présente une croissance quasi-linéaire. À l'issue de chaque interaction avec un choc, le taux de croissance δ_ω (taux d'évasement) devient plus grand. Le cas inerte ne présente aucune différence notable vis-à-vis de l'effet de la viscosité volumique ; les profils de l'évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité pour le cas $\kappa \neq 0$ et $\kappa = 0$ sont presque partout superposés.

On considère maintenant l'évolution spatiale de l'énergie cinétique turbulente $\overline{\rho}\mathcal{K}$, avec $\mathcal{K} = \widetilde{u_i'' u_i''}$, normalisée par $\rho_0 \Delta U^2$. On s'intéresse en particulier aux maxima transversaux de $\mathcal{K}$ comme c'est reporté sur la Figure 9.10. Il peut être déduit que les propriétés moléculaires de viscosité volumique affectent peu en moyenne le développement de l'énergie cinétique

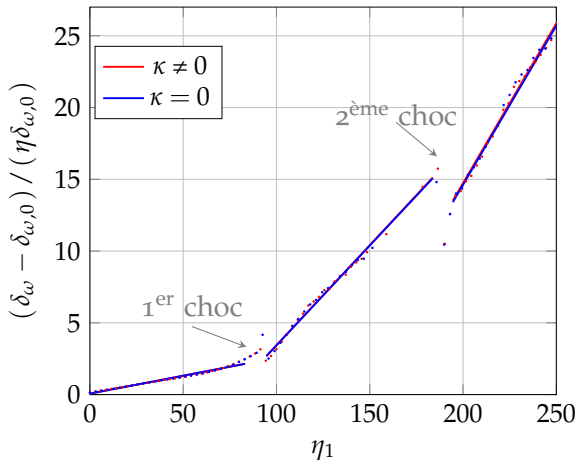


Figure 9.9. *Évolution spatiale de l'épaisseur de vorticité normalisée pour le cas inerte.*

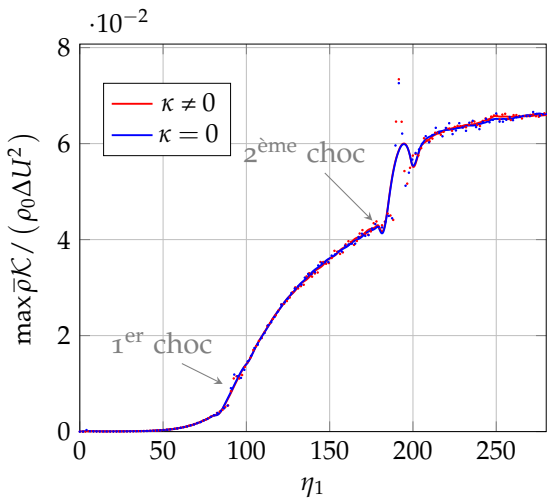


Figure 9.10. *Évolution spatiale longitudinale de la valeur maximale d'énergie cinétique turbulente $\overline{\rho}\mathcal{K}$ normalisée par $\rho_0 \Delta U^2$ pour le cas inerte.*

turbulente dans le cas inerte.

Quant à l'effet de la viscosité volumique sur les statistiques de l'enstrophie $\Omega = \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\omega}/2$ dans la couche cisaillée impactée par le choc oblique, la Figure 9.11 montre l'évolution longitudinale de la valeur maximale d'enstrophie Ω normalisée par $(\Delta U/\delta_{\omega,0})^2$ en chaque section transversale. Comme l'indique cette figure, l'enstrophie diminue continûment au fur et à mesure que la couche de mélange se développe, cela que la viscosité volumique soit prise en compte ou non. L'enstrophie est ainsi peu impactée par la propriété moléculaire de la viscosité volumique dans le cas bidimensionnel. Bien que les champs instantanées de la vorticité aient montré des différences notables quant à la morphologie des structures tourbillonnaires, le passage aux statistiques temporelles moyennées tend à réduire ces différences.

9.4.2 Cas réactif

Le cas inerte a montré que la viscosité volumique n'affecte de façon sensible que les champs instantanés. En effet, les calculs des grandeurs statistiques qui caractérisent globalement le développement des couches de mélanges n'ont montré presque aucune différence. Puisque la viscosité volumique est caractéristique des propriétés moléculaires, on se demande si un

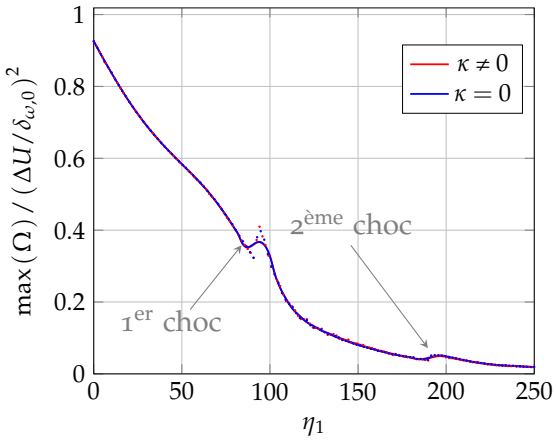
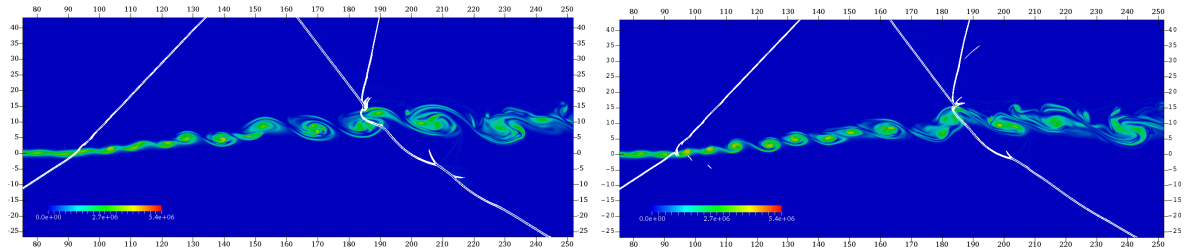


Figure 9.11. *Évolution spatiale longitudinale de la valeur maximale d'enstrophie Ω normalisée par $(\Delta U/\delta_{\omega,0})^2$ pour le cas inerte.*

cas réactif peut révéler des différences que le cas inerte ne montre pas. Pour ceci, on active maintenant le calcul du taux de réaction volumique et on conduit les mêmes comparaisons que celles réalisées dans la section précédente.

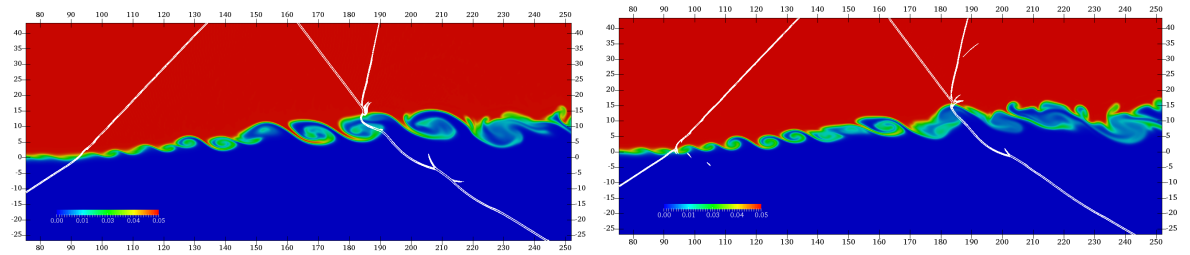
La Figure 9.12 montre le champ de vorticité dans une partie du domaine de calcul pour les deux cas pris en même instant physique. Des iso-lignes du gradient de pression sont superposées sur le même champ. Dans le cas où les effets de viscosité volumique sont pris en compte (cf. Figure 9.12(a)), les structures tourbillonnaires ont une morphologie plus ordonnée et conservent plus de cohérence au passage de la deuxième interaction avec le choc par rapport au cas sans effet de viscosité volumique (cf. Figure 9.23(b)). On note également que le désordre de l'appariement des tourbillons est plus prononcé pour le cas $\kappa = 0$ à partir du deuxième choc. De même, on remarque que de manière similaire au cas inerte l'appariement prématuré des tourbillons en présence des effets de la viscosité volumique ($\eta_1 \approx 110$ pour le cas $\kappa = 0$ et $\eta_1 \approx 127$ pour le cas $\kappa \neq 0$). De même, cette apparition prématurée des tourbillons est plus marquée pour l'hydrogène pour lequel la valeur de masse volumique est petite (cf. Figure 9.13). La Figure 9.13 montre le champ instantané de la fraction massique d'hydrogène H_2 superposé également aux iso-lignes du gradient de pression. Cette figure montrent que la viscosité volumique permet de conserver une cohérence plus marquée avec l'identification de rouleaux de grande taille, surtout aux abscisses $\eta_1 \approx 175$, $\eta_1 \approx 185$ et $\eta_1 \approx 205$. Après le deuxième choc, le cas sans effet de viscosité volumique présente en revanche des structures tourbillonnaires beaucoup plus désorganisées et allongées. Cette observation est plus marquée sur la Figure 9.14 montrant le champ instantané du taux de production de H_2, où les structures croissent au fur et à mesure qu'elles se déplacent de gauche à droite et gardent l'appariement de tourbillon même à la traversée du deuxième choc pour le cas $\kappa \neq 0$, contrairement au cas $\kappa = 0$ où le tourbillon devient distordu.

La Figure 9.15 montre le champ instantané de température superposé avec le gradient de pression et les iso-lignes du taux de dégagement de chaleur. Dans les deux cas, avec et sans effet de viscosité volumique, le champ instantané de température met en exergue, après le premier choc, la présence des régions isolées avec des températures très élevées. Les réactions chimiques qui commencent dans cette région deviennent plus importantes après l'interaction



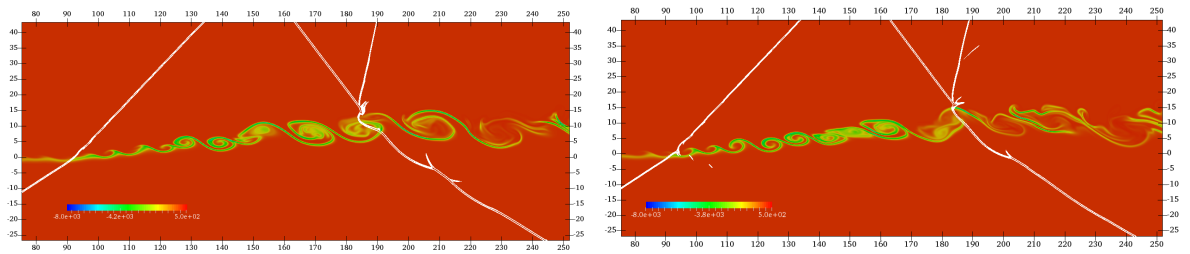
(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

Figure 9.12. *Champ instantané de la vorticité avec superposition d'iso-lignes du gradient de pression (en blanc).*



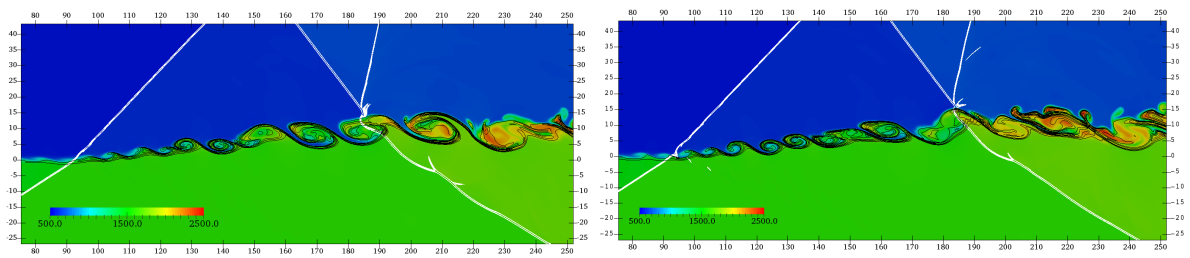
(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

Figure 9.13. *Champ instantané de fraction massique de* H_2 *avec superposition d'iso-lignes du gradient de pression (en blanc).*



(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

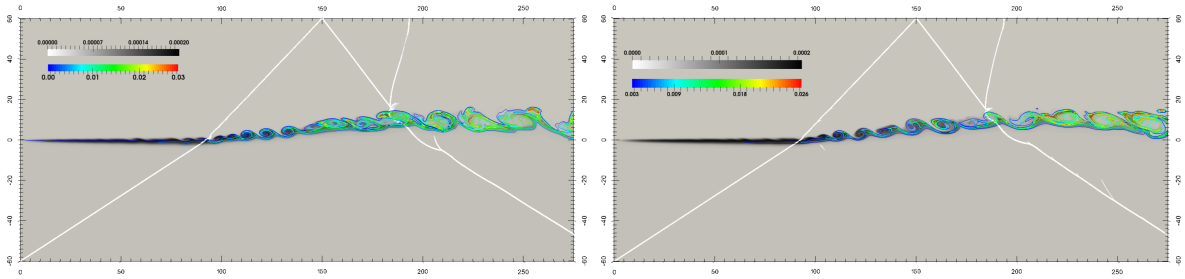
Figure 9.14. *Champ instantané du taux de production de* H_2 *avec superposition d'iso-lignes du gradient de pression (en blanc).*



(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

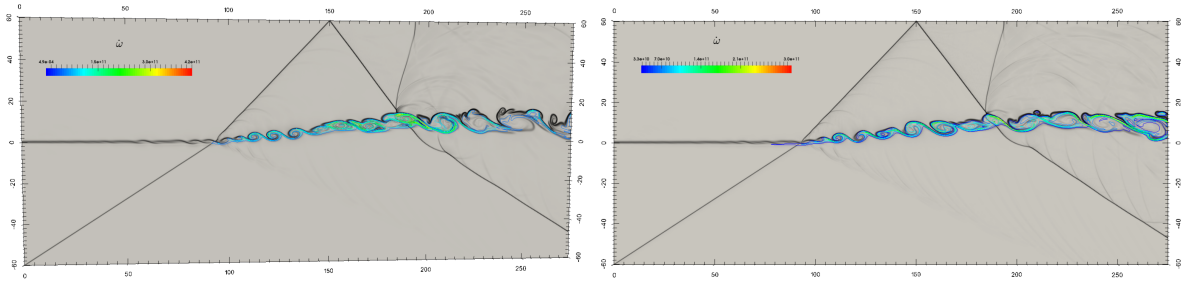
Figure 9.15. *Champ instantané de température avec superposition d'iso-lignes du gradient de pression (en blanc) et du taux de dégagement de chaleur (noires)*

entre le choc réfléchi et la couche de mélange, augmentant substantiellement la température. Une onde de choc additionnelle se forme dans cette deuxième interaction comme résultat de la diminution du nombre de Mach local dû au dégagement de chaleur, ce qui rend l'écoulement légèrement subsonique dans cette zone.



(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

Figure 9.16. *Champ instantané de la fraction massique de* HO_2 *(niveaux gris) superposé aux iso-lignes du gradient de pression (en blanc) et aux iso-lignes de la fraction massique de* OH *(en couleur).*



(a) $\kappa \neq 0$ (b) $\kappa = 0$

Figure 9.17. *Schlieren numérique de la masse volumique superposé aux iso-lignes du taux de dégagement de chaleur*

Nous discutons le processus d'auto-inflammation à l'aide de la Figure 9.16 et la Figure 9.17. La première figure rapporte les fractions massiques de radicaux hydroperoxyle et hydroxyle superposées aux iso-lignes de la norme du gradient de pression. Les radicaux HO_2 commencent à se former juste en aval du plan d'injection au milieu de la couche de mélange. Plus en aval commence un processus d'induction avec une petite partie de ces radicaux HO_2 convertis en radicaux OH dans le mélange pauvre en carburant avant la zone d'impact d'onde de choc. La production des radicaux OH augmente significativement avec formation de poches à l'intérieur des rouleaux, alors que la concentration des radicaux HO_2 diminue progressivement. Ces poches radicaux coïncident avec les régions à haute température et favorisent l'emballement thermique des processus réactifs. Les niveaux maximum de concentration des radicaux d'hydroxyde apparaissent après la deuxième interaction entre le choc réfléchi et la couche de mélange, où le taux de dégagement de chaleur atteint sa valeur maximale, comme l'indique la Figure 9.16. Les radicaux hydroperoxyle qui subsistent se concentrent en dessous de la région de mélange pauvre en carburant, du côté de l'oxydant. La viscosité volumique a pour effet d'augmenter le niveau maximum de concentration des radicaux d'hydroxyde,

ainsi que celui du taux de dégagement de chaleur. Ce dernier décroît notablement lorsque la couche de mélange interagit avec le deuxième choc.

Ces différentes observations mettent en évidence l'effet de la viscosité volumique sur le développement instantané de la couche de mélange réactive, effet qui est tout à fait remarquable. Ceci confirme les observations faites dans le cas inerte. Nous allons maintenant quantifier les différences que peuvent induire les effets de la viscosité volumique sur certaines quantités statistiques dans le cas réactif.

Contrairement au cas inerte, on remarque qu'après la deuxième interaction, l'épaisseur de la vorticité dans le cas avec prise en compte des effets de viscosité volumique se développe moins sensiblement que dans le cas sans viscosité comme le montre la Figure 9.18. De surcroît, on note que l'effet de la viscosité volumique semble plus important dans la zone en aval du deuxième choc où les effets de compressibilité sont les plus importants.

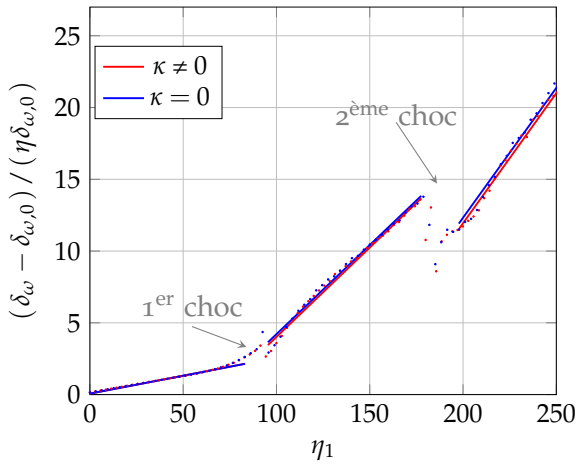


Figure 9.18. *Évolution spatiale de l'épaisseur de vorticité normalisée pour le cas réactif.*

En ce qui concerne l'évolution des maxima transversaux de l'énergie cinétique turbulente, la viscosité volumique accentue légèrement la dissipation d'énergie cinétique turbulente notamment après l'interaction avec le deuxième choc dans le cas réactif (cf. Figure 9.19). Cette observation est en concordance avec l'équation (9.1) qui indique que la dissipation de l'énergie cinétique turbulente dépend du rapport κ/μ. On s'attend ainsi à ce que la dissipation soit d'autant plus marquante que ce rapport est grand.

Pour mieux cerner l'origine de la réduction de l'énergie cinétique juste après le deuxième choc, l'analyse des termes principaux intervenant dans l'équation de transport de cette quantité est effectuée. Nous choisissons une gamme d'abscisses adimenssionnées associée à la zone la plus affectée par cette réduction, en l'occurrence $\eta_1 \in [205, 250]$. L'abscisse $\eta_1 = 235$ est retenue pour cette analyse. La Figure 9.20 montre l'évolution transversale de l'énergie cinétique turbulente, évaluée à cette abscisse. Cette figure confirme une légère réduction de l'énergie cinétique turbulente avec la prise en compte de la viscosité volumique.

L'équation de transport de $\mathcal{K}$ est donnée par :

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\mathcal{K})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_k\mathcal{K})}{\partial t} = \mathcal{P} + \varepsilon + \mathcal{T} + \Pi + \Sigma. \tag{9.18}$$

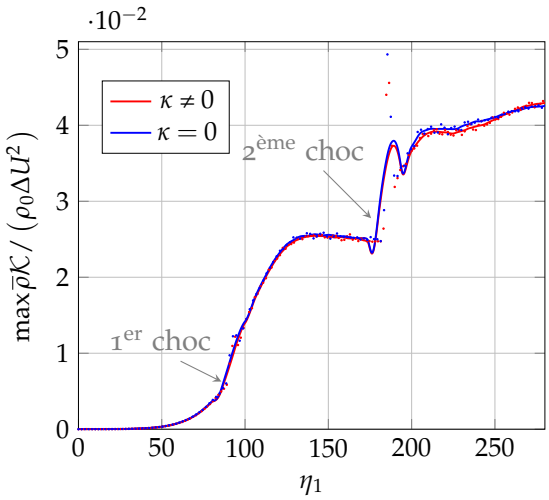


Figure 9.19. *Évolution spatiale longitudinale de la valeur maximale d'énergie cinétique turbulente $\overline{\rho}\mathcal{K}$ normalisée par $\rho_0 \Delta U^2$ pour le cas réactif.*

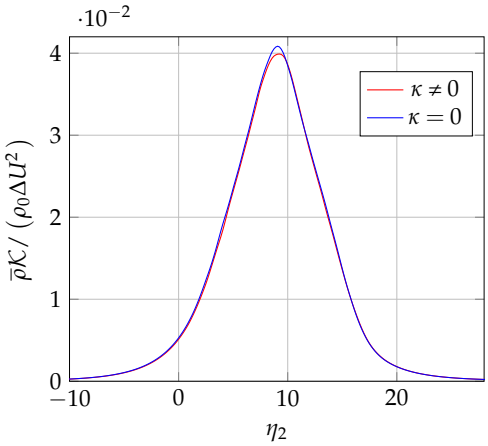


Figure 9.20. *Profil transverse de l'énergie cinétique turbulente $\overline{\rho}\mathcal{K}$ normalisée par $\rho_0 \Delta U^2$ en $\eta_1 = 235$.*

Dans cette équation $\mathcal{P}$ est le terme de production, ϵ le terme de dissipation, $\mathcal{T}$ le terme de transport, Π le terme de pression-dilatation et Σ le terme de flux massique. La relation (9.18) est obtenue à partir de l'équation de transport des tenseurs de Reynolds :

$$\frac{\partial(\overline{\rho}R_{ij})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_k R_{ij})}{\partial t} = \mathcal{P}_{ij} + \varepsilon_{ij} + T_{ij} + \Pi_{ij} + \Sigma_{ij}, \tag{9.19}$$

avec :

- le terme de production est :

$$\mathcal{P}_{ij} = -\overline{\rho}\left(R_{ik}\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_k} + R_{jk}\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k}\right); \tag{9.20}$$

- le taux de dissipation est quand à lui donné par :

$$\varepsilon_{ij} = -\overline{\tau''_{ik}\frac{\partial u''_j}{\partial x_k}} - \overline{\tau''_{jk}\frac{\partial u''_i}{\partial x_k}}; \tag{9.21}$$

- le terme de transport par les fluctuations de vitesse et pression ainsi que les effets

visqueux est :

$$\mathcal{T}_{ij} = -\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_i'u_j'u_k'} + \overline{P''u_i''}\delta_{jk} + \overline{P''u_j''}\delta_{ik} - \overline{\tau_{jk}''u_i''} - \overline{\tau_{ik}''u_j''}\right); \tag{9.22}$$

- le terme de pression-dilatation est défini comme suit :

$$\Pi_{ij} = \overline{P''\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \overline{P''\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}}; \tag{9.23}$$

- le terme de flux massique est donné par :

$$\Sigma_{ij} = \left(\overline{u_i'}\frac{\partial \overline{\tau_{jk}}}{\partial x_k} + \overline{u_j'}\frac{\partial \overline{\tau_{ik}}}{\partial x_k}\right) - \left(\overline{u_i'}\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_j} + \overline{u_j'}\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i}\right). \tag{9.24}$$

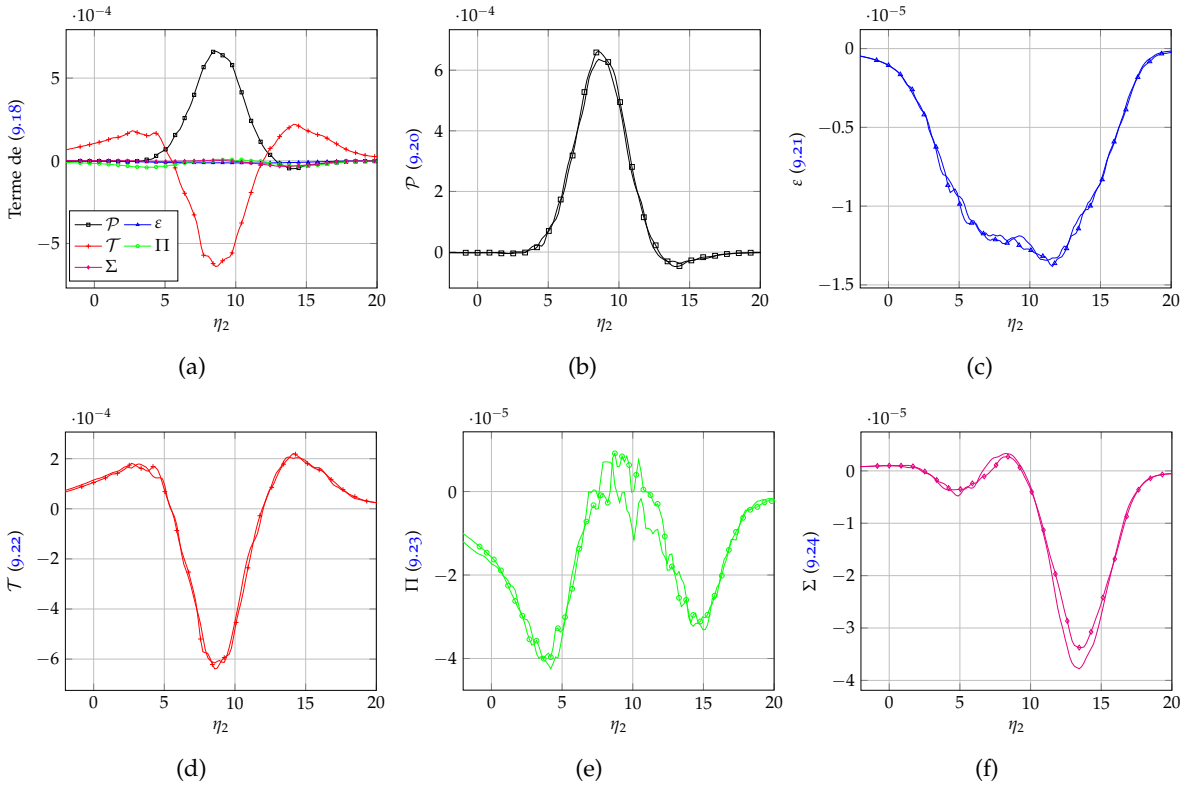


Figure 9.21. *Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente normalisée par $\rho_0 \Delta U^2/\delta_{\omega,0}$ en $\eta_1 = 235$ pour le cas $\kappa \neq 0$ (lignes avec symboles) et $\kappa = 0$ (lignes sans symboles).*

Les résultats présentés dans la Figure 9.21 montrent que les termes les plus importants du bilan d'énergie cinétique turbulente évaluée à $\eta_1 = 235$ sont ceux de la production et transport. Les autres termes sont relégués à un second plan. On note que le terme de production présente une amplitude plus grande lorsque les effets de viscosité volumique sont pris en considération. Le terme de la pression-dilatation présente une amplitude légèrement supérieure pour le cas $\kappa \neq 0$ (cf. Figure 9.21(e)) alors que la contribution due au terme du flux massique s'avère plus important pour le cas $\kappa = 0$ (cf. Figure 9.21(f)). Pour les deux cas, on note que la forme irrégulière des profils est attribuée à l'absence des directions d'homogénéisation, caractéristiques des simulations tridimensionnelles des couches de mélange.

Tous les termes sont normalisés par $\rho_0 \Delta U^2/\delta_\omega$. La Figure 9.21(a) montre que la contribution la plus importante à la création d'énergie cinétique turbulente provient du terme de production (cf. Figure 9.21(b)). Ce terme est compensé, en grande partie, par le transport turbulent. Ce dernier terme contribue à la création d'énergie en périphérie de la couche de mélange tandis qu'au sein de la couche il devient négatif. Cette quantité se comporte comme un mécanisme qui enlève l'énergie des régions caractérisées par de fort cisaillement pour la déposer dans caractérisées par des niveaux d'énergie plus faibles. Elle présente une amplitude plus grande lorsque les effets de viscosité volumique sont pris en considération (cf. Figure 9.21(d)). Le terme de dissipation, considéré comme un terme puits, présente lui aussi un niveau plus grand dans le cas $\kappa \neq 0$ comme le montre la Figure 9.21(c). Le terme de la pression-dilatation présente une amplitude légèrement supérieure pour le cas $\kappa \neq 0$ (cf. Figure 9.21(e)) alors que la contribution due au terme du flux massique, bien qu'elle reste négligeable par rapport aux termes termes, s'avère plus important pour le cas $\kappa = 0$ (cf. Figure 9.21(f)).

Maintenant qu'on a identifié les processus responsables de la réduction de l'énergie cinétique turbulente en présence des effets liés à la viscosité volumique, on s'intéresse finalement aux effets de cette dernière sur les statistiques de l'enstrophie. Comme cela a été fait pour les cas inertes, l'enstrophie ne présente aucune différence quand à la prise en compte ou pas de κ (cf. Figure 9.22).

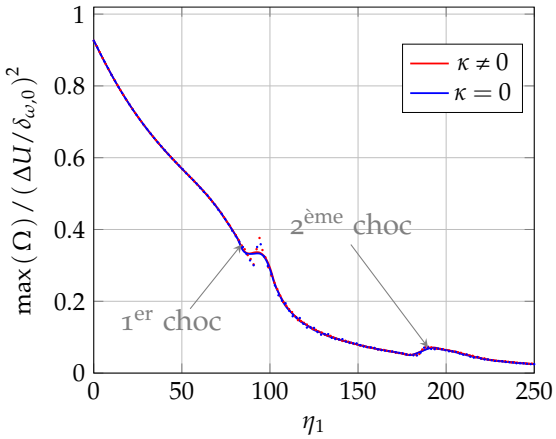


Figure 9.22. *Évolution spatiale longitudinale de la valeur maximale de l'enstrophie Ω normalisée par $(\Delta U/\delta_{\omega,0})^2$ pour le cas réactif.*

Les simulations bidimensionnelles ont mis en évidence que la viscosité volumique agit de façon plus marquée sur les champs instantanées que sur les caractéristiques statistiques de la couche de mélange impactée par le choc oblique. En outre, la cinétique chimique a montré une légère différence par rapport au cas inerte quant à l'évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité et l'énergie cinétique. La section suivante est consacrée à l'étude de l'influence possible des effets tridimensionnels. L'objectif étant de montrer si la configuration tridimensionnelle est plus affectée que la configuration bidimensionnelle par la présence ou non de la viscosité volumique.

9.5 Couche de mélange impactées par un choc oblique : cas tridimensionnel

La configuration du mélange, l'initialisation des calculs, les conditions limites (de nouvelles conditions de périodicité sont définies dans les sens de l'envergure x_3) sont strictement les mêmes que pour le cas bidimensionnel (cf. Tableau 9.2 et Tableau 9.4). Les perturbations permettant le déclenchement naturel des instabilités au sein de la couche de mélange sont fixées de la manière suivante :

$$v_p = \varepsilon_1 \alpha U_c \exp\left(-\frac{(x_1 - x_{1,0})^2 + (x_2 - x_{2,0})^2}{\Delta x_0^2}\right) \cos\left(\frac{2\pi (x_3 - x_{3,0}) p_{\text{env}}}{L_3} + \varepsilon_2 \pi\right), \tag{9.25}$$

où ε_1 et ε_2 sont deux nombres aléatoires qui oscillent entre -1 et $+1$. Les quantités α et Δx_0 sont, respectivement, l'amplitude et l'échelle de longueur de la perturbation. La relation (9.25) présente une forme sinusoïdale selon l'envergure avec un décalage en phase aléatoire [87]. La valeur de p_{env} choisie correspond à 3 périodes complètes de cette fonction sinusoïdale suivant la direction de l'envergure. Cette perturbation est appliquée à la composante transversale et selon l'envergure de la vitesse, en $(x_{1,0}, x_{2,0}, x_{3,0}) = (4\delta_{\omega,0}, 0, L_3/2)$.

Tableau 9.6 *– Paramètres géométriques correspondant aux simulations inertes. Le domaine de calcul a pour dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ et il est discrétisé uniformément avec un nombre de points $N = N_1 \times N_2 \times N_3$. L'épaisseur de vorticité initiale $\delta_{\omega,0}$, utilisée comme longueur de référence, est calculée à partir de $Re_{\omega,0} = 640$.*

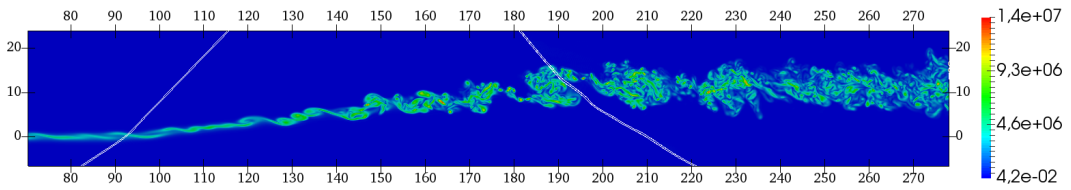
$L_1/\delta_{\omega,0}$	$L_2/\delta_{\omega,0}$	$L_3/\delta_{\omega,0}$	N_1	N_2	N_3	N
275	120	15	1650	720	180	$\approx 213 \times 10^6$

Les caractéristiques du maillage ainsi que la taille des domaines sont reportées dans le Tableau 9.6. Pour rappel, l'obtention des couches de mélange inertes se fait en négligeant les termes sources chimiques dans les équations de Navier-Stokes, comme c'était le cas pour les simulations bidimensionnelles inertes.

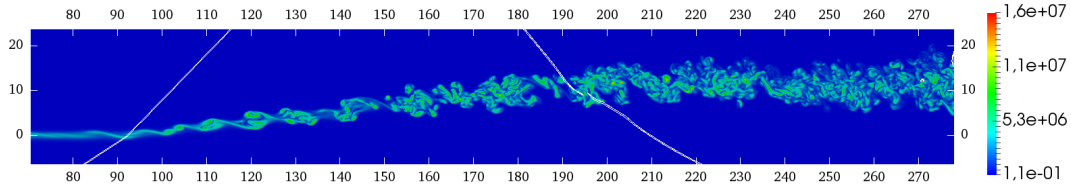
9.5.1 Comparaison qualitative

On commence par comparer l'effet de la viscosité volumique sur quelques caractéristiques instantanées du développement spatial tridimensionnel . Dans les deux cas (avec et sans prise en compte des effets de κ), la couche de mélange se développe spatialement en donnant naissance à une dynamique fortement tridimensionnelle au sein de laquelle il est possible d'observer la prédominance des structures tourbillonnaires induites par le choc oblique.

La Figure 9.23 montre le champ de vorticité dans le plan médian $x_1 - x_3$ à $t\Delta U/L_1 = 20$. Elle démontre que les effets tridimensionnels et le choc oblique font que l'écoulement au sein de la couche cisaillée est dominée par les structures tourbillonnaires. La prise en



(a) $\kappa \neq 0$



(b) $\kappa = 0$

Figure 9.23. *Champ instantané de la vorticité dans le plan $x_1 - x_2$ superposé aux iso-lignes du gradient de pression (en blanc).*

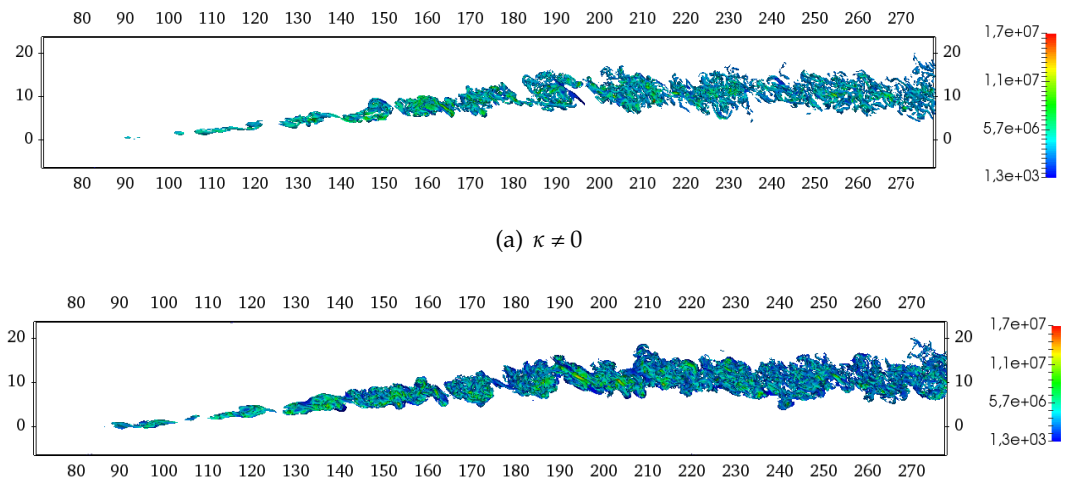
compte de la viscosité volumique conduit à une organisation tourbillonnaire sensiblement différente. En premier lieu, La formation des tourbillons s'avère de plus façon prématurée juste après l'interaction avec le premier choc. On note que ceci a été observé dans le cas bidimensionnel en ne prenant pas en compte les effets de la viscosité volumique. Toutefois, dans le cas tridimensionnel la création des premiers tourbillons est nettement plus marquée. Une deuxième différence est mise en évidence grâce à la Figure 9.24 qui montre la distribution de l'intensité énergétique en utilisant le critère Q (coloré par la vorticité) pour la détection de structures tourbillonnaires. Cette différence concerne l'intensité d'appariement dans le cas où $\kappa = 0$, en particulier après l'interaction avec le deuxième choc. Ces deux différences de comportement suggèrent que les mécanismes tourbillonnaires sont influencés par les effets de la dilatation. On remarque également une activité tourbillonnaire moins marquée dans le cas où les effets de viscosité volumique sont considérés, ce qui reflète un niveau de dissipation accrue.

Ceci est démontré davantage par la Figure 9.24 qui met en exergue le champ instantané du taux de dissipation scalaire. Ces observations qualitatives justifient l'intérêt d'utiliser plutôt des configuration tridimensionnelle de la couche de mélange pour investiguer l'effet de κ.

9.5.2 Comparaison quantitative

Les simulations ont été conduites pendant un temps suffisamment long pour générer une base de données des analyses statistiques. En outre, les domaines de calcul choisis sont suffisamment étendus dans la direction longitudinale pour atteindre un niveau turbulence suffisamment développé.

L'effet de la viscosité volumique est dans un premier temps analysé à travers l'épaisseur de vorticité. La Figure 9.25 reporte une comparaison de l'évolution de ce paramètre dans les deux



(a) $\kappa \neq 0$

(b) $\kappa = 0$

Figure 9.24. *Visualisation dans le plan médian $x_1 - x_2$ du champ instantané du critère Q coloré par la vorticité.*

cas $\kappa \neq 0$ et $\kappa = 0$. La sélection du taux d'expansion de la couche de mélange calculé se divise en trois régions distinctes, celles avant et après le premier choc et puis celle correspondante à la zone après l'interaction avec le deuxième choc (cf. Tableau 9.7). Avant le premier choc, la croissance de la couche de mélange est quasiment identique dans les deux cas $\kappa = 0$ et $\kappa \neq 0$. Entre le premier et le deuxième choc, le taux de croissance de la couche de mélange dans le cas $\kappa = 0$ est sensiblement supérieur à celui calculé dans le cas $\kappa \neq 0$. Á partir du deuxième choc, la couche de mélange change de loi de croissance en adoptant cette fois un taux inférieur à celui de la deuxième région. Dans cette troisième région, l'épaisseur de vorticité en présence des effets dilatationnels est inférieure à celle calculée en leur absence. Cette inhibition de l'expansion de la couche de mélange est consistante avec la morphologie des appariements discutée précédemment.

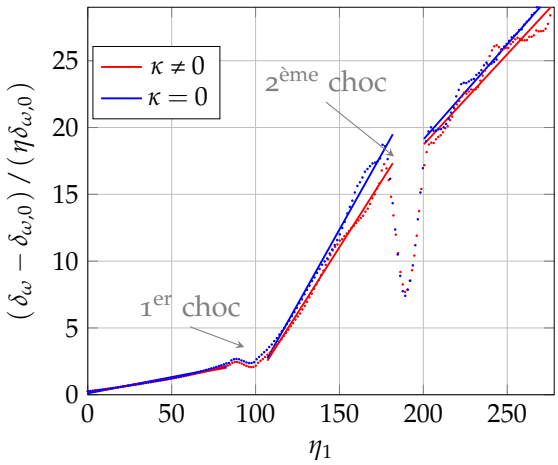


Figure 9.25. *Évolution spatiale de l'épaisseur de vorticité normalisée.*

Tableau 9.7 – *Valeurs de $\eta^{-1}\mathrm{d}\delta_\omega/\mathrm{d}x_1\,(-)$ obtenues dans les couches de mélange tridimensionnelles inertes.*

Cas	Région avant le premier choc	Région après le premier choc	Région après le deuxième choc
$\kappa = 0$	0.023	0.223	0.142
$\kappa \neq 0$	0.022	0.192	0.137

Profils moyens

La Figure 9.26 présente l'évolution longitudinale des profils transversaux de vitesse et du scalaire passif $\mathcal{Z}$ pour les deux cas $\kappa \neq 0$ et $\kappa = 0$ à différentes abscisses. La valeur du scalaire $\mathcal{Z}$ n'est pas calculé *a priori* à l'aide d'une équation de transport additionnelle comme ce fut le cas dans le précedent chapitre §8, mais elle est calculée *a posteriori* en utilisant la méthode proposée par Pierce [212] dans sa thèse. Le calcul de cette variable est issue de la conservation des fractions massiques atomiques ou élémentaires a_γ. Ces fractions sont définies par :

$$a_\gamma = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{\mathrm{sp}}} \frac{Y_\alpha N_{\alpha\gamma} A_\gamma}{W_\alpha}, \tag{9.26}$$

avec $N_{\alpha\gamma}$ le nombre d'atomes γ contenus dans la α^{me} molécule et A_γ le poids atomique correspondant. La variable de mélange s'obtient en sommant et en normalisant les fractions massiques élémentaires :

$$\mathcal{Z} = \frac{\sum_\gamma |a_\gamma - a_{\gamma,o}|}{\sum_\gamma |a_{\gamma,c} - a_{\gamma,o}|}, \tag{9.27}$$

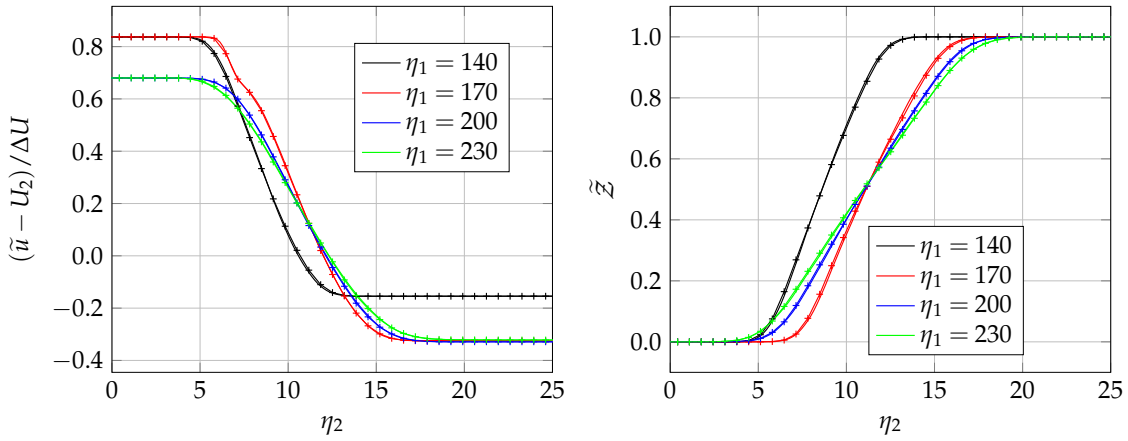
où $a_{\gamma,c}$ et $a_{\gamma,o}$ sont les fractions massiques atomiques dans le courant de combustible et d'oxydant, respectivement.

Le champ de vitesse et celui du scalaire présentent des caractéristiques quasi-identiques que la viscosité volumique soit prise en compte ou pas. Néanmoins, nous notons que les minima atteints par la valeur moyenne de pression sont plus importants pour le cas $\kappa \neq 0$ comme l'indique la Figure 9.27. Cette constatation est en adéquation avec les résultats de Gonzalez et Emanuel [95] concernant la forte sensibilité du champ de pression à l'hypothèse de Stokes et la forte modification de la distribution du champ de pression pour de grandes valeurs du rapport κ/μ.

Statistiques du tenseur de Reynolds et variance du scalaire passif

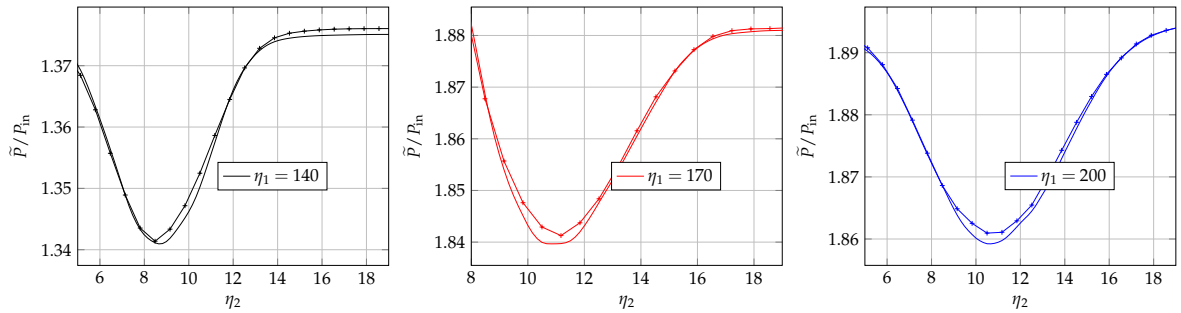
Maintenant qu'on a remarqué que les statistiques du premier ordre ne révèlent pas une différence très importante en présence des effets de viscosité volumique, on présente dans cette partie les moments d'ordre 2 de vitesse et du scalaire passif.

La Figure 9.28 reporte le profil longitudinal des maxima transversaux de $\overline{\rho}\mathcal{K}$. On note maintenant que le caractère tridimensionnel de la simulation a beaucoup plus d'effet sur



(a) (b)

Figure 9.26. *Profils de vitesse longitudinale moyenne normalisés par ΔU et du scalaire passif moyen tracés à différentes abscisses. Les lignes continues correspondent aux cas $\kappa \neq 0$ et continues avec la même couleurs et avec symbole $(+)$ correspondent aux cas $\kappa = 0$*



(a) (b) (c)

Figure 9.27. *Profils longitudinaux de pression moyenne normalisée par sa valeur à l'entrée P_{in} tracés à différentes abscisses. Mêmes symboles que ceux retenues dans la Figure 9.26.*

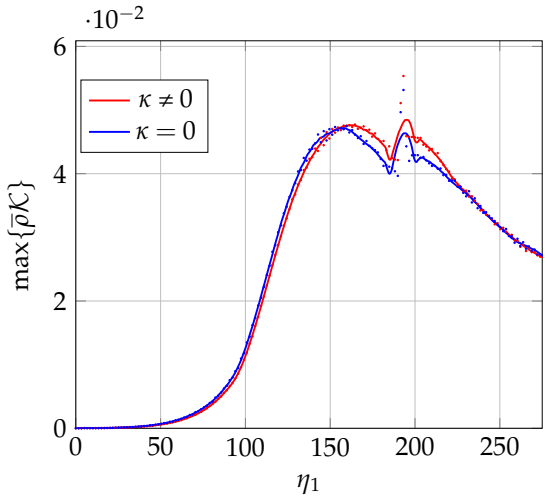


Figure 9.28. *Évolution spatiale des maxima transversaux de l'énergie cinétique $\overline{\rho}\mathcal{K}$ normalisés par $\rho_0 \Delta U^2$.*

l'évolution spatiale de l'énergie cinétique dans le cas bidimensionnel. Jusqu'à l'abscisse $\eta_1 \approx 150$, l'absence de viscosité volumique surestime le cas où l'effet de κ est considéré. La région s'étendant de $\eta_1 = 150$ jusqu'au deuxième choc est caractérisée par un changement

de comportement dans le cas $\kappa \neq 0$ prend plus d'amplitude que $\kappa = 0$. Cette région est caractérisée par une forte réflexion d'ondes de la paroi supérieure. Après le deuxième choc, les maxima de l'énergie cinétique sans prise en compte des effets de viscosité volumique continuent à sous-estimer ceux du cas $\kappa \neq 0$ jusqu'à l'abscisse $\eta_1 = 275$ et puis la tendance s'inverse légèrement. On peut anticiper que sans le deuxième choc et les différents chocs parasites qu'il produit, l'énergie cinétique turbulente sera sous-estimée quand l'effet de κ n'est pas pris en compte, ce qui confirme que les effets dilatationnels contribuent à augmenter la dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

Dans les tensions de Reynolds, les contraintes diagonales représentent les composantes de l'énergie cinétique turbulente. Les contraintes de cisaillement interviennent dans la production de cette énergie. La Figure 9.29 présente l'évolution longitudinale des tensions de Reynolds, de la variance du scalaire passif et des corrélations vitesse-scalaire passif pour les deux cas étudiés $\kappa \neq 0$ et $\kappa = 0$. On choisit de montrer l'évolution transversale des différentes tensions à trois abscisses représentatives des variations subies par l'énergie cinétique présentée sur la Figure 9.28. Les tensions de Reynolds (cf. Figure 9.29(a),Figure 9.29(b) et Figure 9.29(c)) montrent que les maxima des composantes diagonales de ce tenseur confirment ce que nous venons de constater sur la Figure 9.28. La Figure 9.29(f) montre l'évolution longitudinale du flux scalaire $\overline{\mathcal{Z}'u_1'}/(u_{1,\mathtt{RMS}}\mathcal{Z}_{\mathtt{RMS}})$. Il peut être déduit de la Figure 9.29(f) que la valeur maximale de la corrélation entre la vitesse longitudinale et le scalaire représentant le transport du scalaire est sous-estimée quand les effets de viscosité volumique ne sont pas considérés. Il serait ainsi opportun de considérer la viscosité volumique dans la modélisation du transport scalaire dans les couches de mélanges supersoniques inertes.

La Figure 9.30 montre la variance des fractions massiques au sens de Reynolds des espèces constituant le mélange. L'hydrogène ayant le plus grand rapport κ/μ est celui qui présente la plus grande différence entre les deux cas $\kappa = 0$ et $\kappa \neq 0$. La principale différence observable dans les quatre plans réside dans les niveaux maximum atteints et la forme qui varient en fonction de l'espèce considérée. En effet, nous observons que la forme des profils observés pour toutes les espèces est plus large, indiquant ainsi que le fluide s'incorpore de façon plus marquée quand les effets de viscosité de volume sont pris en compte, ce qui conduit à une réduction des fluctuations autour de la valeur moyenne. Cet effet est également obtenu dans les couches de mélange avec l'augmentation du taux de compressibilité [176, 184].

Moments d'ordre supérieur

Il est intéressant dans le cas d'une simulation 3D de considérer l'évolution des moments d'ordre trois et quatre des fluctuations de vitesse et de scalaire passif. Ceux-ci, normalisés par leurs corrélations doubles respectives, permettent d'avoir accès respectivement au coefficient d'asymétrie (*Skewness*) et au coefficients d'aplatissement (*Flatness*). On rappelle que l'étude de ces deux paramètres permet de renseigner sur la forme des PDFs et de quantifier le comportement des champs fluctuants, notamment par rapport à la loi de Gauss. Dans ce

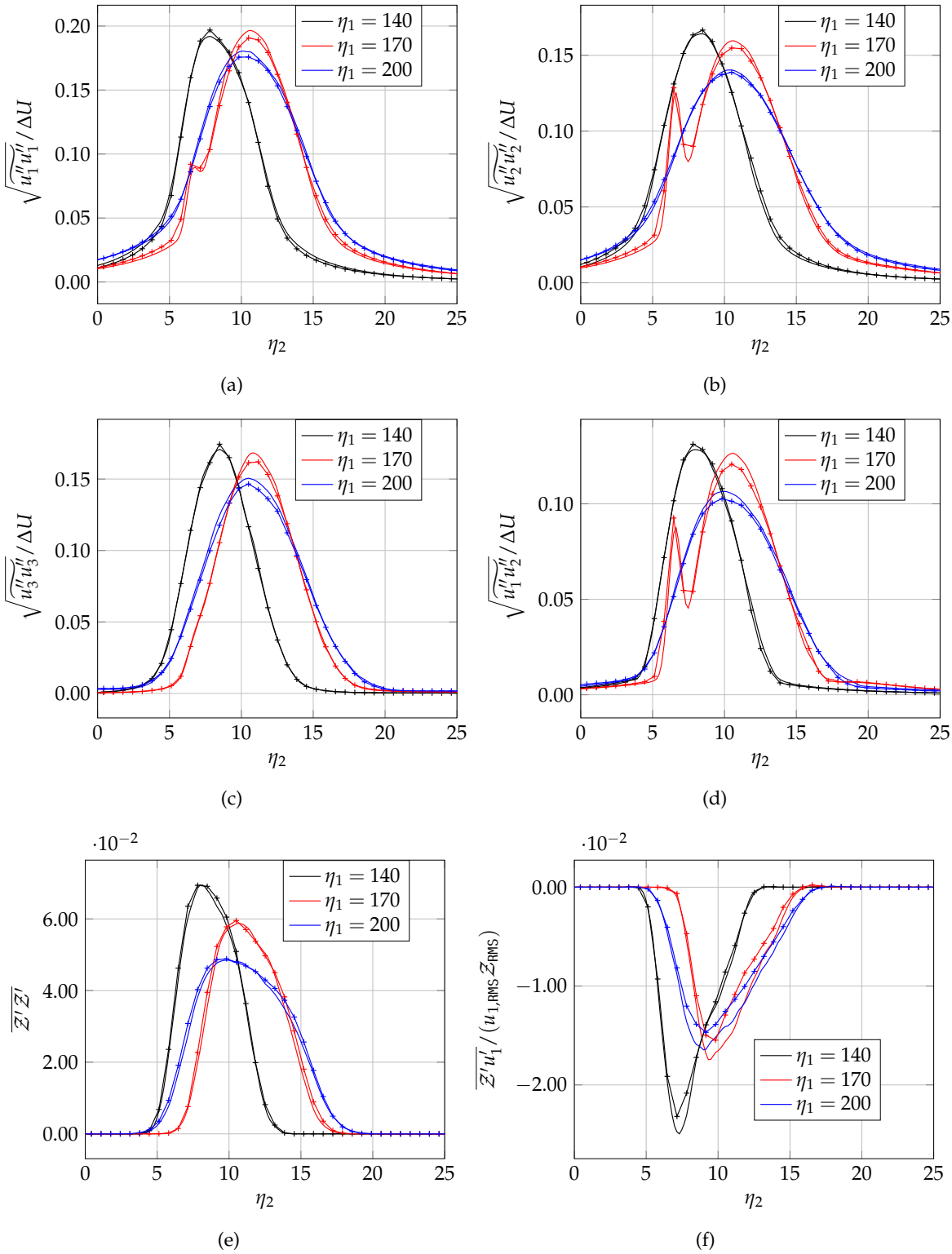


Figure 9.29. *Profils de vitesses RMS déduites de la contrainte de Reynolds normalisée par ΔU et de la variance des fluctuations du scalaire passif $\mathcal{Z}$ à différentes abscisses. Mêmes symboles que ceux de la Figure 9.26.*

dernier cas, le coefficient d'asymétrie vaut zéro et celui d'aplatissement est égal à trois. À contrario l'éloignement de ces valeurs permet de caractériser une intermittence de la

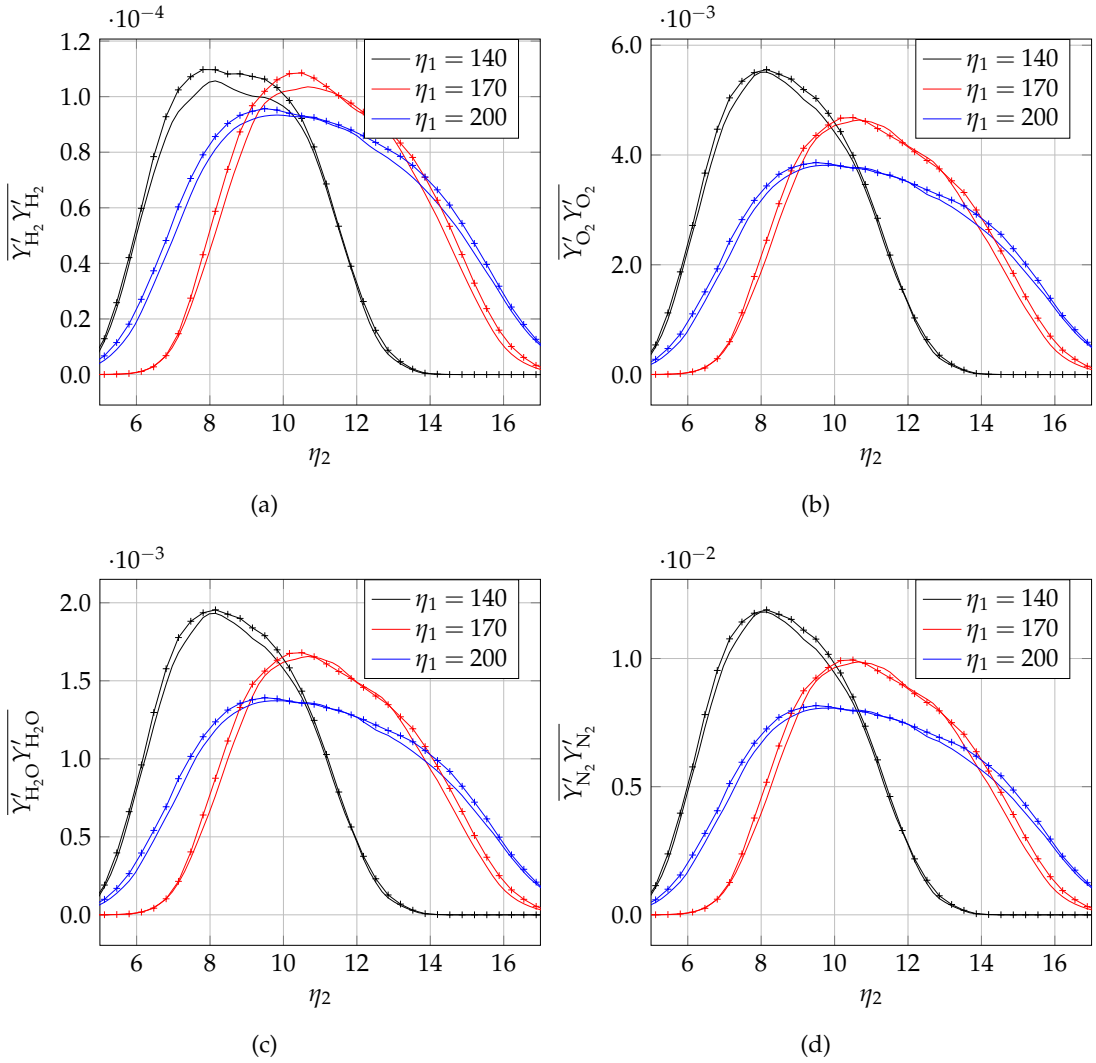


Figure 9.30. *Profils des variances de fractions massiques des espèces massiques à différentes abscisses. Mêmes symboles que ceux de la Figure 9.26.*

turbulence.

La Figure 9.31 superpose les profils transversaux de $\mathcal{S}_{u'_1}$, $\mathcal{S}_{u'_2}$, $\mathcal{S}_{\mathcal{Z}'}$, $\mathcal{F}_{u'_1}$, $\mathcal{F}_{u'_2}$ et $\mathcal{F}_{\mathcal{Z}'}$ obtenus dans quatre plans et pour les deux cas $\kappa = 0$ et $\kappa \neq 0$. Dans les écoulements uniformes extérieurs à la couche de mélange, les facteurs d'asymétrie et d'aplatissement valent respectivement égaux à 0 et 3 de façon plus approchée quand $\kappa \neq 0$, ce qui indique une distribution gaussienne de la turbulence résiduelle en dehors de la zone de mélange. En s'approchant des frontières de la zone de mélange, une variation brusque de ces deux coefficients est naturellement observée. Le signe de la variation du coefficient d'asymétrie dépend du côté par lequel la frontière est abordée, soit du côté flux rapide-froid soit du côté lent-chaud. En considérant la frontière du côté haute vitesse et basse température, les événements intermittents, qui viennent perturber le flux uniforme rapide et froid, sont des bouffées de fluides lentes et chaudes, ce qui se traduit par des pics négatifs de la vitesse fluctuante et positifs de la température et donc un $\mathcal{S}_{u'}$ négatif et un $\mathcal{S}_{T'}$ positif. A contrario, du côté

basse vitesse et haute température, $\mathcal{S}_{u'}$ est positif et $\mathcal{S}_{T'}$ est négatif. Le signe de $\mathcal{S}_{v'}$ se déduit directement du signe des fluctuations transverses de vitesse liées aux éjections de fluide d'un flux adjacent vers l'autre. Ces événements intermittents influencent de manière aussi brusque les coefficients d'aplatissement que les coefficients de dissymétrie (cf. Figure 9.31). Ainsi, les différents profils approchent une forme antisymétrique pour les coefficients de dissymétrie et une forme symétrique pour les coefficients d'aplatissement. On peut remarquer que les positions où s'annulent les coefficients d'asymétrie $\mathcal{S}_{u'_1}$, $\mathcal{S}_{u'_2}$ et $\mathcal{S}_{Z'}$ correspondent aux positions des extrema sur leur profil de variance respective. Le niveau des pics de $\mathcal{S}_{Z'}$ et $\mathcal{F}_{Z'}$ est beaucoup plus important, c'est la raison pour laquelle nous avons présenté seulement leur profils pour les deux plans transversaux $\eta_1 = 140$ et $\eta_1 = 200$ en coupant les niveaux extrema pour ne montrer que la tendance. Nous remarquons que la viscosité volumique a pour effet d'amplifier les pics observés pour les coefficients de dissymétrie et d'aplatissement, ce qui indique des gradients de vitesse plus importants en considérant les effets de la viscosité volumique. De plus, en partant de l'intérieur de couche de mélange et en allant vers les frontières des deux écoulements uniformes, on remarque que la zone d'intermittence apparaît plus prématurément en présence des effets de dilatation de viscosité volumique. Dans la zone frontière, et ce pour les deux coefficients et en tout plan, les profils ont des formes différentes pour les fluctuations transverses de vitesse u'_2. L'intermittence, assez brutale à la frontière de la couche de mélange, permet de ramener rapidement l'écoulement à l'équilibre, comme l'indique la valeur très proche de 0 pour $\mathcal{S}_{u'_1}$ et de 3 pour $\mathcal{F}_{u'_1}$.

Équation de transport de l'énergie cinétique turbulente

L'analyse des termes principaux intervenant dans l'équation de transport de cette quantité est effectuée afin d'analyser les différences observées sur l'évolution de l'énergie cinétique à cause des effets de la viscosité volumique. La Figure 9.32 montre que la contribution la plus importante à la création d'énergie cinétique turbulente provient du terme de production et augmente avec la prise en compte de κ. Ce terme est compensé, en grand partie, par le terme de dissipation, qui est également plus affecté par les effets de dilatation. Le terme de transport turbulent contribue à la création d'énergie en périphérie de la couche de mélange tandis qu'au sein de la couche de mélange, il devient négatif. Cette quantité, plus importante dans le cas $\kappa \neq 0$, se comporte comme un mécanisme qui enlève l'énergie des régions présentant un fort cisaillement pour la déposer dans des régions caractérisées par des niveaux d'énergie plus faibles. La Figure 9.32 montre que les contributions dues aux termes de pression-dilatation et de flux massique restent négligeables pour les deux cas. Le terme de dissipation ε devient plus grand dans la partie de la couche de mélange où la valeur maximale de $\mathcal{K}$, calculée avec $\kappa \neq 0$, devient grand par rapport au cas où cette valeur maximale est plus petite.

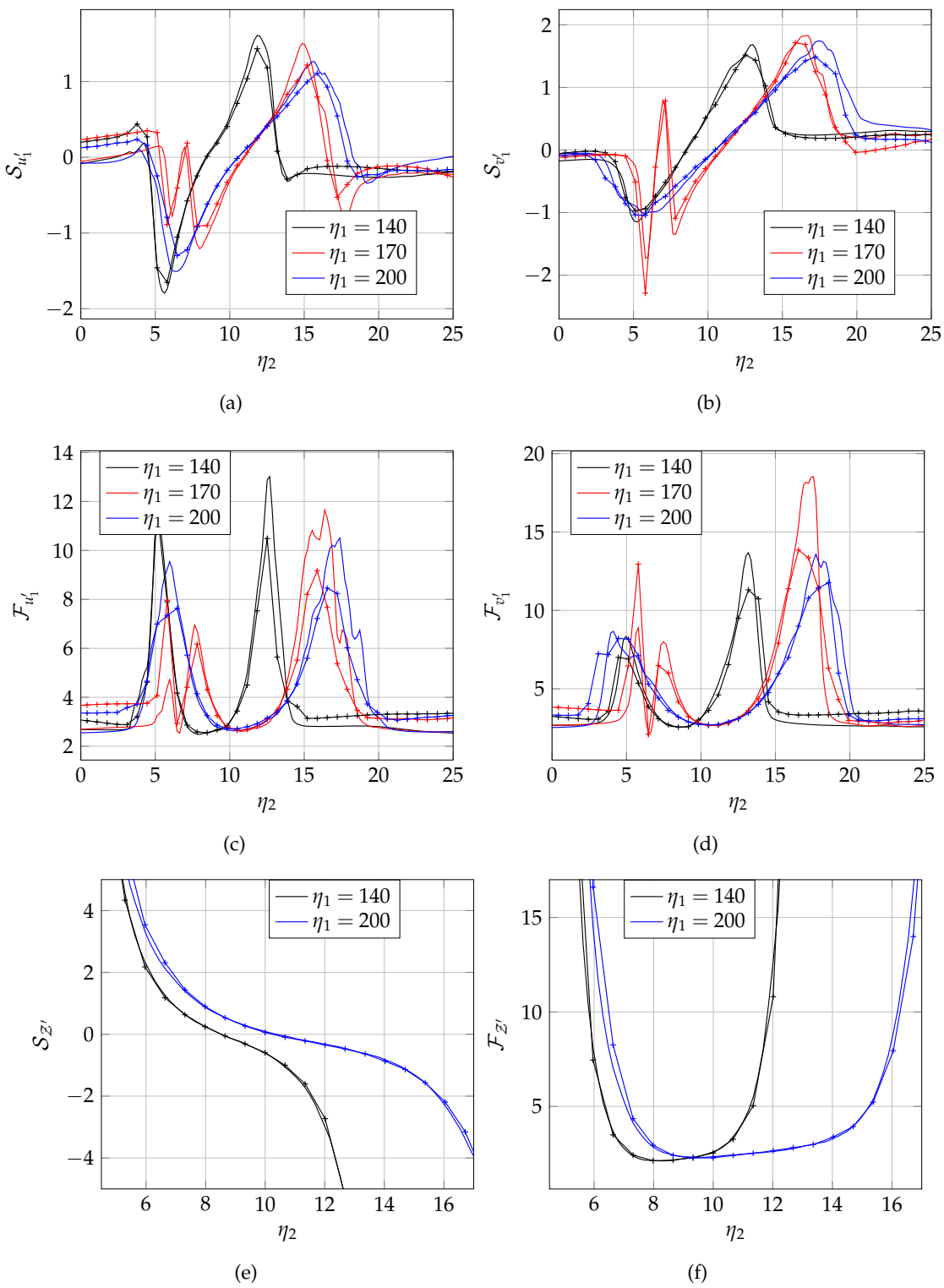


Figure 9.31. *Coefficient de dissymétrie et d'aplatissement associés aux statistiques des vitesses fluctuantes u' et v' et du scalaire passif $\mathcal{Z}'$. Mêmes symboles que ceux de la Figure 9.26.*

Équation de transport de l'enstrophie

La Figure 9.33 reporte l'évolution longitudinale de la valeur maximale d'enstrophie Ω normalisée par $(\Delta U/\delta_{\omega,0})^2$ en chaque section transversale. Ces deux courbes présentent

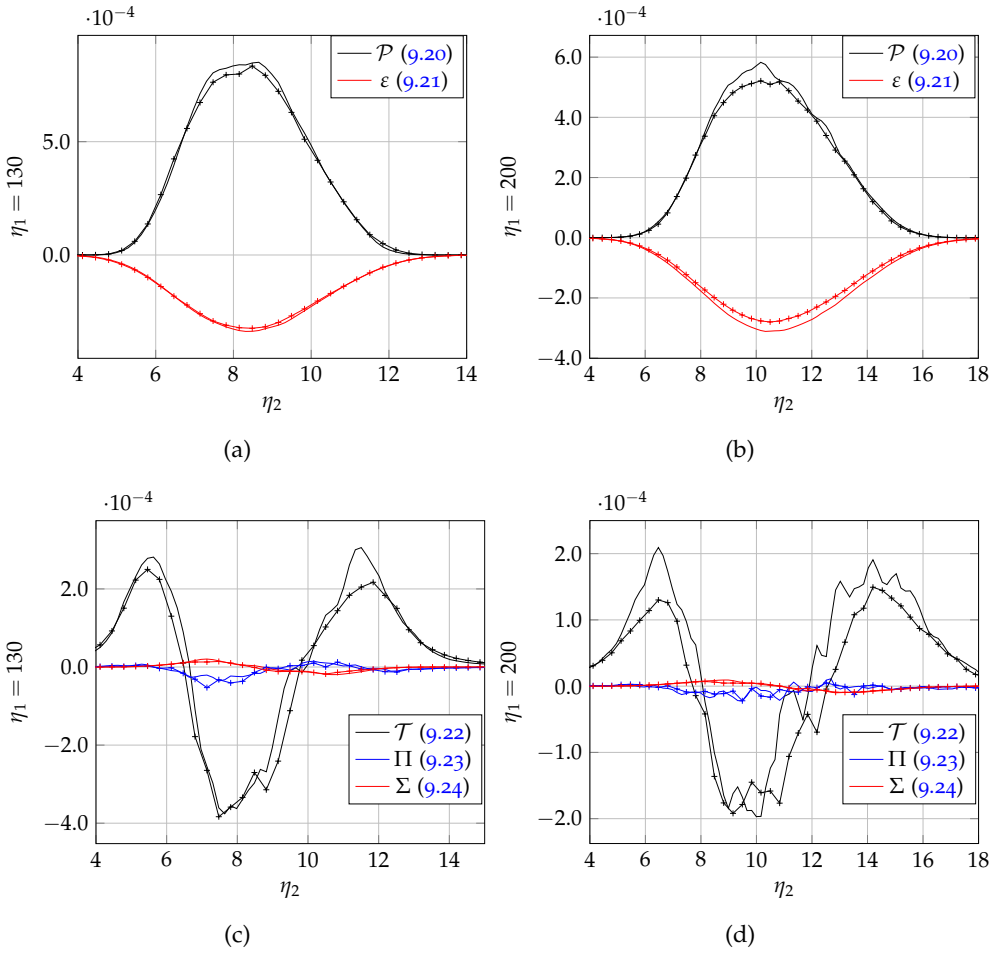


Figure 9.32. *Bilan de l'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente $\Delta U^3/\delta_{\omega,0}$. Mêmes symboles que ceux de la Figure 9.26.*

deux régions. Jusqu'à l'interaction avec le deuxième choc, la valeur maximale de l'enstrophie obtenue avec $\kappa = 0$ semble sous-estimée par rapport à celle obtenue avec $\kappa \neq 0$. Au delà de ce deuxième choc, les deux valeurs deviennent tout à fait comparables.

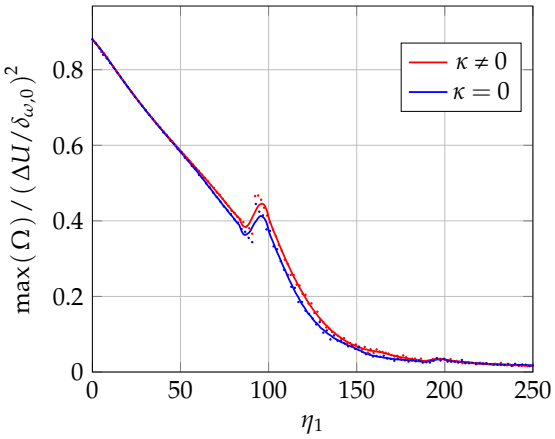


Figure 9.33. *Évolution spatiale longitudinale de la valeur maximale d'enstrophie Ω normalisée par $(\Delta U/\delta_{\omega,0})^2$*

On considère maintenant deux abscisses représentatives de ces deux régions pour étudier les mécanismes responsables des différences observées. La Figure 9.34 montre la contribution

des termes intervenant dans l'équation de transport de l'enstrophie (9.28) afin d'identifier l'effet de la viscosité volumique sur le processus responsable de la création de vorticité au sein de la couche de mélange. Il s'agit des termes intervenant dans l'équation de transport de l'enstrophie Ω donnée par :

$$\frac{\mathrm{D}\overline{\Omega}}{\mathrm{D}t} = \underbrace{\overline{\omega_i \omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}}_{\mathcal{E}} - \underbrace{\overline{\omega_i \omega_i \frac{\partial u_j}{\partial u_j}}}_{\mathcal{D}} + \underbrace{\overline{e_{ijk} \omega_i \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial x_k}}}_{\mathcal{B}} + \underbrace{\overline{e_{ijk} \omega_i \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{km}}{\partial x_m} \right)}}_{\mathcal{V}} \tag{9.28}$$

où le tenseur de permutation s'écrit $e_{ijk} = (i-j)(j-k)(k-i)/2$. Les quatre termes qui apparaissent à droite de l'égalité (9.28) décrivent, respectivement, l'étirement tourbillonnaire, l'expansion volumique (dilatation ou compression), le couple barocline et les effets visqueux.

Nous remarquons que les contributions les plus importantes proviennent des termes d'étirement tourbillonnaire et de diffusion visqueuse. La viscosité volumique a pour effet indirect d'augmenter la création des échelles turbulentes par étirement. Le terme de diffusion visqueuse est légèrement supérieur en terme d'amplitude également quand $\kappa \neq 0$. Le terme couple barocline augmente lui aussi légèrement quand les effets de viscosité volumique ne sont pas considérés, tandis que le terme couple de dilatation ne subit pas de variation significative.

Récapitulatif

Dans ce chapitre, l'étude de l'effet de viscosité volumique sur le développement spatial des couches de mélange compressibles inertes et réactives impactées par un choc oblique a été abordée à l'aide de simulations numériques directes. Le mélange que nous avons retenu dans cette étude est composé d'hydrogène et d'air. Il est représentatif des régimes de fonctionnement des bancs d'essais actuels. Dans un premier temps, le cas bidimensionnel des couches de mélange inertes et réactives a été traité. La conséquence constatée sur le développement de la couche de mélange concerne principalement les champ instantanés. Le cas réactif a montré de légères différences par rapport au cas inerte quant à l'évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité et à celle de l'énergie cinétique. Des simulations tridimensionnelles de couches de mélange inertes ont été ensuite conduites. Nous avons observé que l'influence de la viscosité volumique est plus marquée sur le taux de croissance de la couche de mélange dans ce cas. Elle tend en effet à diminuer le taux de croissance par rapport au cas où elle n'est pas prise en compte. L'analyse des statistiques des moments d'ordre supérieur à deux a été ensuite abordée. Elle a montré que la viscosité volumique a pour effet d'amplifier les gradients de vitesse au niveau des frontières de la couche de mélange, et par conséquence, elle tend à accélérer le retour à l'équilibre de l'écoulement.

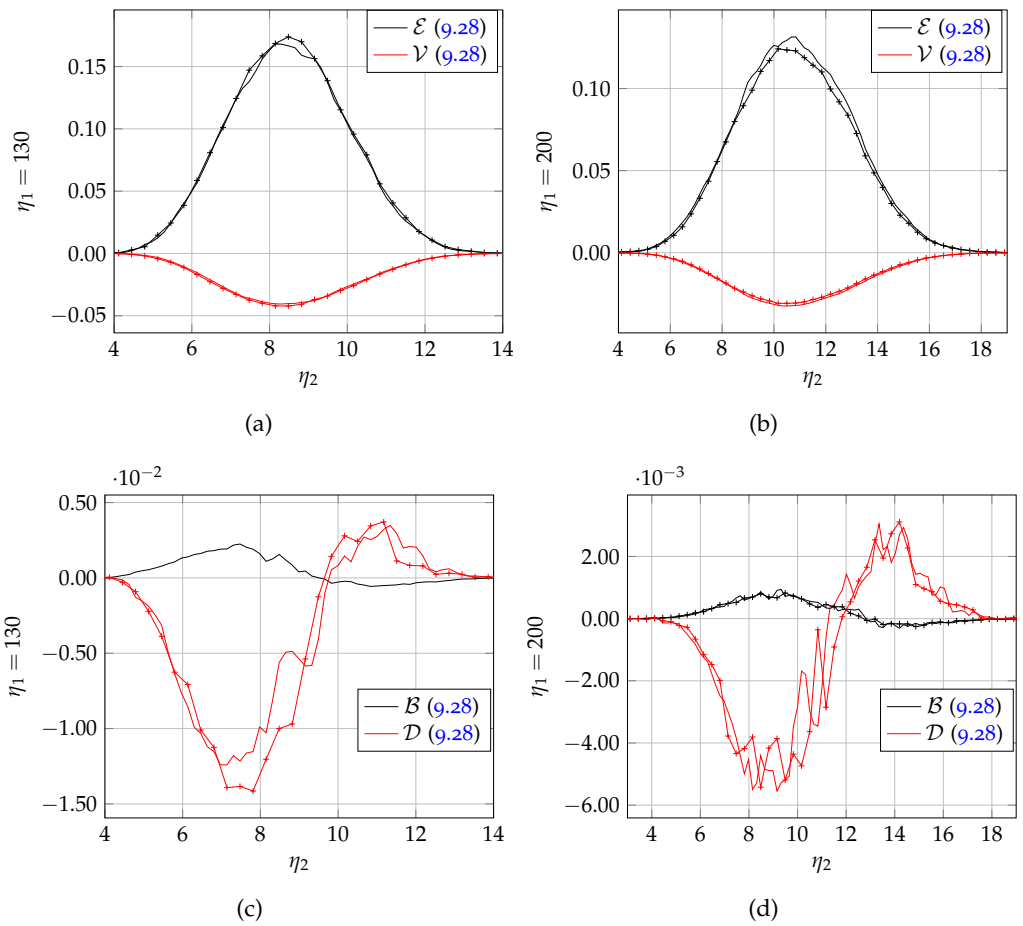


Figure 9.34. *Bilan de l'équation de transport de l'enstrophie normalisée par* $\Delta U^3/\delta^3_{\omega,0}$. *Mêmes symboles que ceux de la Figure 9.26.*

10

Conclusions et perspectives

Ce travail mené au sein de l'équipe de recherche "Structures de Flammes et Combustion Turbulente" de l'Institut Pprime a pour finalité de contribuer à l'amélioration de la compréhension des écoulements compressibles dans des configurations canoniques et représentatives du fonctionnement des statoréacteurs et superstatoréacteurs. Finalement, plusieurs volets ont été étudiés pour progresser vers la réalisation de cet objectif. Nous donnons ci-dessous un aperçu des différents développements significatifs réalisés au sein de l'équipe de recherche.

Méthodes de frontières immergées

Nous avons d'abord contribué au développement d'outils destinés à prendre en compte la complexité géométrique dans le cadre des simulations mettant en œuvre des schémas numériques de haute précision. Une méthode de frontières immergées a été développée pour simuler des écoulements compressibles dans un code maison CREAMS. Le but principal était d'avoir en disposition une stratégie permettant d'accroître la complexité géométrique d'une configuration tout en préservant le caractère structuré du solveur. Ce dernier est un bon candidat à la description précise d'écoulements complexes, du fait de l'utilisation de schémas numériques d'ordre élevé et de la simplicité de génération de maillage qui réduit notablement le coût CPU de calcul par rapport aux codes non structurés.

Une synthèse bibliographique liée à la philosophie commune de l'ensemble des approches liées aux méthodes de frontières immergées est d'abord présentée. Elle a permis de classifier une grande partie des méthodes de frontières immergées en deux formalismes qui se distinguent par le caractère continu ou discret du terme source de forçage permettant de simuler l'interaction fluide-solide. Nous avons retenu dans le cadre de cette thèse une technique mettant à profit les deux formalismes : (i) la méthode PVM provenant du formalisme "forçage continu" qui fait intervenir un terme de forçage continu agissant sur les équations de quantité de mouvement. Un des aspects délicats concernant ce premier formalisme est le traitement de la condition de flux thermique imposée en paroi. (ii) la méthode GPM basée sur le formalisme

"forçage discret" est couplée à la première méthode afin de corriger l'équation d'énergie et de généraliser les conditions aux limites scalaires.

Nous avons analysé en détail le bon comportement de la méthode proposée. De plus, nous avons réalisé une étude de convergence en maillage afin d'évaluer la précision de notre méthode de frontières immergées. Des simulations ont été conduites sur l'écoulement supersonique autour d'un cylindre pour cinq résolutions de maillage. L'ordre de précision de la méthode a s'avère être supérieur à deux. La méthode retenue a été également soumise à un bon nombre de cas tests afin d'évaluer sa capacité à décrire la dynamique d'écoulements compressibles à bas et à grand nombre de Reynolds, mais également à reproduire les propriétés de réflexion, de diffraction et d'interaction d'ondes de choc sur un obstacle. Pour les différents cas tests étudiés afin de valider la robustesse de la méthode développée, les résultats ont montré que la procédure d'immersion fonctionne correctement aussi bien du point de vue de la différenciation des points fluide/solide dans le maillage, grâce à la méthode d'identification que nous avons mise en place, que de la bonne implémentation des conditions frontières sur les objets immergés, et que la globalité des propriétés des écoulements étudiés a été restituée de manière satisfaisante.

En parallèle de nos activités liées à la méthode de frontière immergée, le solveur `CREAMS` a été couplé avec la librairie `HDF5` (*Hierarchical Data Format 5*)[103] pour une meilleure gestion des formats de description de données. De plus, le couplage de `CREAMS` avec la librairie `CVODE` nous a conduit à réécrire la librairie `CHEMKIN` sous une forme modulaire en `FORTRAN90`. Cette implémentation nous permis d'obtenir un gain de temps de calcul `CPU` de l'ordre de 10% sur le calcul de la couche de mélange bidimensionnelle du chapitre §9.

Interaction choc-turbulence/scalaire

Dans cette partie de la thèse, nous avons doté le solveur `CREAMS` des différents outils numériques lui permettant d'être utilisé efficacement pour le problème d'interaction choc-turbulence/scalaire. Une attention particulière a été apportée à la façon (i) de construire l'algorithme de génération du champ initial de `THI` compressible, (ii) d'injecter proprement les champs issus de la `DTHI` dans le domaine de calcul, (iii) de définir le maillage pour une meilleure résolution des petites structures de turbulence et une bonne résolution de la discontinuité induite par l'onde de choc, et (iv) de maintenir la stationnarité statistique du choc droit par le biais de l'étude menée sur les conditions de sortie.

Une base de données pour le problème d'interaction choc-turbulence basée sur des simulations numériques directes `DNS` a été mise en place. Cette base de données comprend trois valeurs de Mach amont ($M_1 = 1.7,\ 2.0$ et 2.3). Les caractéristiques de la turbulence post-choc ont été analysées en détail et ont confirmé les tendances observées dans les études numériques antérieures. L'analyse correspondante concerne des propriétés élémentaires d'interaction choc-turbulence, telles que (i) les facteurs d'amplification, (ii) l'anisotropie de

turbulence, qui est évaluée à partir des invariants du tenseur d'anisotropie de contrainte de Reynolds, (iii) l'interaction entre la vorticité, l'enstrophie et le tenseur du taux de déformation, (iv) l'effet du choc sur le vecteur d'étirement et les directions principales du tenseur $\mathcal{S}$, et (v) l'évolution des échelles de longueurs à la traversée de l'onde de choc.

Le processus de mélange est ensuite étudié en présence de choc. Il n'existe en effet pas d'études dédiées à l'effet du processus d'interaction choc-turbulence sur les fluctuations du champ scalaire. Une base de données supplémentaire a donc été créée pour étudier cette configuration. Elle contient six simulations dont les caractéristiques sont similaires à la base de données consacrée à l'étude de choc-turbulence, dont trois sont conduites sans choc pour servir comme référence aux trois autres en présence de choc. Les fluctuations de scalaire passif sont, de plus, injectées dans le domaine de calcul. On s'est intéressé dans cette étude à une mise en évidence de l'intensification du processus du mélange et de l'atténuation de la turbulence scalaire par le biais (i) d'une comparaison de l'évolution spatiale de la variance scalaire et du taux de dissipation dans le cas choqué et non choqué, (ii) d'une étude de l'alignement du gradient scalaire avec les directions principales du tenseur de déformations et en particulier avec la valeur propre correspondante à la direction intermédiare (qui nous renseigne sur l'intensité du transfert turbulent) et (iii) d'une analyse des échelles de longueur (micro-échelles scalaires de Taylor).

Effet de la viscosité volumique

Le dernier volet de thèse complémente le précédent, dans le sens où il considère une configuration d'interaction choc et couche de mélange, tout en mettant l'accent sur l'effet de la viscosité volumique sur le développement de la couche de mélange. Le choc est introduit dans cette configuration afin d'augmenter la compressibilité de la couche de mélange et de mettre, plus au clair, l'effet du coefficient du transport κ. Afin d'étudier l'effet de la viscosité volumique en présence de la cinétique chimique, seule la configuration bidimensionnelle a été considérée. Les résultats obtenus montrent que la viscosité volumique agit plus particulièrement sur les champs instantanés. Par contre, ses effets sont peu notables quand le développement de la couche de mélange est quantifiée par ses statistiques. Les effets de la viscosité volumique sont ensuite étudiés dans une configuration tridimensionnelle. Dans ce cas, nous avons observé, que ce soit sur des champs instantanés ou des statistiques (telles que le taux d'évasement, les facteurs de dissymétrie et d'aplatissement), que la prise en compte des effets du coefficient κ conduit à des résultats différents de ceux obtenus quand il est mis à zéro dans les simulations.

Perspectives

Nous dressons finalement une liste de perspectives intéressantes par rapport aux trois volets traités dans cette thèse :

Méthodes de frontières immergées

- l'usage de notre méthode de frontières immergées est pour le moment restreint à l'utilisation d'objets immergés sans mouvement. Il semble, à court terme, indispensable de traiter le cas d'objets en mouvements. Ceci fait l'objet d'un travail en cours en collaboration avec une équipe de recherche Italienne ;
- une meilleur maîtrise des erreurs induites par certaines instabilités au niveau de l'interface fluide-solide, représentée dans le cadre de cette thèse sous la forme d'une géométrie en marche d'escalier, pourrait être acquise par le biais d'une méthode de raffinement de maillage. La gestion du raffinement que nous avons employée se fait selon différents axes et ceci constitue un point faible commun de tout maillage cartésien couplé à une méthode de frontières immergées. Le couplage de CREAMS avec une librairie de raffinement de maillage automatique, i.e. une méthode de raffinement localisée (AMR pour *Adaptive Mesh Refinement*) offre une perspective intéressante. Bien que l'approche AMR soit coûteuse en terme de mémoire et de temps CPU, il a été néanmoins observé qu'elle reste moins coûteuse par rapport aux approches non-structurées [112, 121] ;
- la simulation de cas réels est sujette à une optimisation plus poussée du code en terme de temps de calcul même si des efforts sur la parallélisation MPI ont déjà été effectués. Dans ce sens, il serait fort intéressant de répartir la charge de calcul des termes sources de la méthode de frontières immergées entre les processeurs. Cette optimisation servira également pour répartir la charge des calculs dédiés aux termes sources de la partie chimique du code.

Interaction choc-turbulence/scalaire

- le nombre de Reynolds turbulent Re_λ reste encore inférieur à celui jugé nécessaire pour atteindre la transition vers une turbulence pleinement développée pour le problème d'interaction choc-turbulence. Cette contrainte limite l'étude des statistiques des moments d'ordre supérieur. La difficulté majeure serait alors d'ordre numérique, car pour simuler ce problème par le biais d'une simulation de type DNS tout en augmentant Re_λ, le domaine de calcul doit être discrétisé plus finement. Avec les différentes optimisations apportées au solveur CREAMS, cette perspective est très envisageable. Il serait également intéressant de varier à la fois le nombre du Mach convectif M_1 et turbulent M_t sur des gammes plus larges. Ceci peut lever le désaccord sur certaines différences entre les résultats numériques/numériques et numériques/expérimentaux, par exemple les difficultés observées quant au comportement des échelles de longueurs à travers le choc et au retour à l'isotropie des tenseurs de Reynolds et de variances de vorticité.
- un développement numérique pour la capture des chocs et de la turbulence est nécessaire si la perspective d'augmenter le nombre de Reynolds est envisagée. Il serait intéressant de doter CREAMS de schémas numériques moins dissipatifs capables de prendre en considération la présence de fortes discontinuités sans introduire d'oscillations numériques.

- outre la compréhension des différents processus intervenant dans le phénomène d'interaction choc-turbulence/scalaire, les résultats acquis au cours de cette étude peuvent être utilisés pour mettre en place des modèles de turbulence de type RANS ou LES. L'équipe de recherche a déjà acquis une certaine expérience dans la modélisation des termes de transport turbulent des scalaires et du taux de dissipation scalaire, il serait ainsi possible d'évaluer la représentativité des modèles dans cette configuration d'écoulement turbulent.

Effet de la viscosité volumique

- la simulation tridimensionnelle de l'interaction choc-couche de mélange a mis en évidence quelques modifications induites par la viscosité volumique. La prise en compte de la cinétique chimique est susceptible d'amplifier les différences observées. Par conséquent, il serait intéressant de simuler cette configuration tridimensionnelle dans le cas réactif.
- la présence de choc en plus des effets liés à la viscosité volumique rend l'analyse de la configuration choc-couche de mélange compliquée. Il serait ainsi intéressant de conduire une simulation de la configuration sans choc pour un nombre de Mach convectif plus grand. Cette configuration est en cours de calcul avec $M_c = 1.1$.

A

Réactions particulières pour le calcul du taux de réaction

En plus de leur dépendance à la température, certaines réactions dépendent également de la pression. Ces réactions sont appelées des réactions de *Fall-Off*. D'autre part, les réactions de recombinaison font intervenir un troisième corps :

$$A + B + M \leftrightarrow C + M, \tag{A.1}$$

où M est appelé partenaire de collision. Son rôle consiste à récupérer l'excès d'énergie de l'espèce transitionnelle afin de la stabiliser. Cette annexe a pour objectif d'apporter quelques élements complémentaires concernant le calcul du taux de réaction pour de telles réactions.

A.1 Effet du troisième corps

Pour une réaction où intervient un troisième corps, l'expression du taux de réaction est modifiée par la concentration efficace du mélange pour la réaction j

$$C_i = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \alpha_{ij} C_j \,, \tag{A.2}$$

où les coefficients α_{ij} sont des facteurs dépendants de l'efficacité de l'espèce en tant que troisième corps de la réaction i. Pour ce cas :

$$C_i = C_m = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} C_j = \frac{P}{\mathcal{R}T} = \frac{\rho}{W} \,. \tag{A.3}$$

De plus, une simple espèce peut agir en tant que troisième corps si l'on pose $C_i = C_m$, où la m-ième espèce est le troisième corps.

A.2 Effet de Fall-Off

Pour les réactions dépendantes de la pression, la constante de vitesse prend deux formes en fonction du domaine basse ou haute pression considérée. La difficulté réside dans la formulation du taux de réaction dans la zone de transition (pression intermédiaire), appelée zone de *Fall-Off*, la variation de la constante de vitesse y est relativement complexe. Plusieurs formulations sont utilisées pour exprimer cette dépendance, mais elles ont toutes la même expression de la constante de vitesse, k_f :

$$k_f = k_\infty \left(\frac{P_r}{P_r + 1} \right) \digamma, \tag{A.4}$$

où k_∞ la constante de vitesse déterminée dans la gamme des hautes pressions, et P_r la pression réduite donnée par $P_r = k_0 \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}_{sp}} C_\alpha / k_\infty$, avec k_0 la constante de vitesse déterminée dans la gamme des basses pressions. Le facteur d'augmentation correctif $\digamma$ change suivant les différentes formulations :

$$\digamma = \begin{cases} 1 & \text{pour Lindemann } et\ al. \text{ [164]}, \\ \digamma_{\text{cent}}^{\left(1+(A_{\text{Troe}}/B_{\text{Troe}})^2\right)^{-1}} & \text{pour Gilbert } et\ al. \text{ [92]}, \\ dT^e \left(a \cdot \exp\left(-\frac{b}{T}\right) + \exp\left(-\frac{T}{c}\right) \right)^X & \text{pour Stewart } et\ al. \text{ [248]}. \end{cases} \tag{A.5}$$

Les constantes de la formulations de Gilbert *et al.* [92] sont données par :

$$\begin{cases} \digamma_{\text{cent}} = (1-a)\exp\left(-\frac{T}{T^{***}}\right) + a \cdot \exp\left(-\frac{T}{T^*}\right) + \exp\left(-\frac{T^{**}}{T}\right), & \text{(A.6a)} \\ A_{\text{Troe}} = \log_{10} P_{r,i} - 0.67 \log_{10} \digamma_{\text{cent}} - 0.4\,, & \text{(A.6b)} \\ B_{\text{Troe}} = 0.806 - 1.1762 \log_{10} \digamma_{\text{cent}} - 0.14 \log_{10} P_r\,, & \text{(A.6c)} \end{cases}$$

où a, T^{***}, T^*, et T^{**} sont des coefficients, dit de *Troe*, propres à chaque réaction. En outre, dans la formulation de Stewart *et al.* [248] apparaît l'exposant $X = \left(1 + \left(\log_{10} P_r\right)^2\right)^{-1}$, où a, b, and c sont des paramètres associés à cette formulation. Les paramètres d et e sont optionnels. Par défaut, ils valent $d = 1$ et $e = 0$.

B

Coefficients de transport multi-espèces

Nous exposons ici quelques détails concernant le calcul des coefficients de transport détaillé.

B.1 Viscosité volumique

Dans les cas de gaz parfaits monoatomiques, la viscosité volumique est nulle et il existe très peu de corrélation pour les gaz denses. On utilisera donc les valeurs issues de la théorie cinétique des gaz calculées par inversion de systèmes linéaires en utilisant la bibliothèque optimisée EGLIB.

La viscosité volumique est typiquement de la forme :

$$\kappa = \frac{\mathcal{R}P}{c_v^2} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} X_k c_k^{\text{int}} \tau_k^{\text{int}}, \tag{B.1}$$

où c_k^{int} représente la capacité calorifique interne et τ_k^{int} un temp moyen de relaxation de cette énergie.

B.2 Viscosité de cisaillement

La théorie cinétique des gaz permet de déduire une viscosité de cisaillement dans le cadre des basses pressions. La dérivation de Chapman-Enskkog présentée par Chapman et Cowling [44] donne pour un gaz pur i :

$$\mu_i = 2.6693 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{W_i T}}{\Omega_{\mu,i} \sigma_i^2}, \tag{B.2}$$

où σ_i le diamètre moléculaire de l'espèce i utilisé dans le potentiel de Lennard-Jones et $\Omega_{\mu,i}$ une intégrale de collision réduite dépendant de la forme du potentiel d'interaction intermoléculaire. Dans le cas d'un gaz de Lennard-Jones, cette intégrale est donnée par :

$$\Omega_{\mu,i} = A(T_i^\star)^B + Ce^{DT_i^\star} + Ee^{FT_i^\star}, \tag{B.3}$$

avec $T^\star$ la température réduite donnée par $T^\star = T/(\varepsilon_i/k)$, où k_B est la constante de Boltzmann et ε_i est la profondeur d'interaction. Les constantes apparaissant dans (B.3) sont données par $A = 1.16145$, $B = -0.14874$, $C = 0.52487$, $D = -0.7732$, $E = 2.16178$ et enfin $F = -2.43787$.

B.3 Coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion $D_{\alpha\beta}$ est obtenu par la théorie cinétique des gaz diluées de Chapman-Enskog :

$$D_{\alpha\beta} = \frac{0.0266}{\Omega_{D,\alpha\beta}} \frac{T^{3/2}}{P\sqrt{W_{\alpha\beta}}\sigma_{\alpha\beta}^2}, \tag{B.4}$$

où $W_{\alpha\beta} = 2/(1/W_\alpha + 1/W_\beta)$ la masse moléculaire réduite, $\sigma_{\alpha\beta} = (\sigma_\alpha + \sigma_\beta)/2$ le diamètre moléculaire de collision et $\Omega_{D,\alpha\beta}$ est une intégrale de collision réduite dépendant du potentiel intermoléculaire donné par :

$$\Omega_{D,\alpha\beta} = A^\star(T_{\alpha\beta}^\star)^{B^\star} + C^\star e^{D^\star T_{\alpha\beta}^\star} + E^\star e^{F^\star T_{\alpha\beta}^\star} + G^\star e^{H^\star T_{\alpha\beta}^\star}, \tag{B.5}$$

où $A^\star = 1.06036$, $B^\star = -0.1561$, $C^\star = 0.19300$, $D^\star = -0.47635$, $E^\star = 1.03587$, $F^\star = -1.52996$, $G^\star = 1.76474$, $H^\star = -3.89411$, et $T_{\alpha\beta}^\star = T/\sqrt{\epsilon_\alpha\epsilon_\beta/k_B^2}$.

B.4 Conductivité thermique partielle

On note λ_i et λ la conductivité thermique partielle et la conductivité thermique du mélange, respectivement. Elles sont telles que :

$$\lambda = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \frac{\lambda_i Y_i/W_i^{1/2}}{Y_i/W_i^{1/2}}. \tag{B.6}$$

C

Intégration des termes réactifs

Les équations décrivant la combustion adiabatique à pression constante d'un mélange de gaz réactifs sont définies par :

$$\frac{d\boldsymbol{\psi}}{dt} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{t})), \text{ avec } \boldsymbol{\psi}(t = t_0) = \boldsymbol{\psi}_0, \tag{C.1}$$

avec :

$$\boldsymbol{\psi} = \left\{T, Y_1, Y_2, \ldots, Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}-1}\right\}^t, \tag{C.2}$$

et :

$$\boldsymbol{S} = \left\{-\frac{1}{\rho c_v}\sum_{\alpha=1}^{N} h_\alpha W_\alpha \dot{\omega}_\alpha,\ \frac{W_1\dot{\omega}_1}{\rho},\ \frac{W_2\dot{\omega}_2}{\rho},\ \cdots,\ \frac{W_{\mathcal{N}_{\text{sp}}-1}\dot{\omega}_{\mathcal{N}_{\text{sp}}-1}}{\rho}\right\}. \tag{C.3}$$

La fraction massique de la dernière espèce, $Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}}$, est déterminée en utilisant la loi de la conservation de masse :

$$Y_{\mathcal{N}_{\text{sp}}} = 1 - \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}-1} Y_k\,. \tag{C.4}$$

Cette espèce est souvent assignée à l'espèce la plus abondante (e.g., N_2 dans nos simulations). Soit $\mathcal{J}$ la matrice Jacobienne associée au vecteur d'ODE de (C.1). Cette matrice est remplie par les dérives partielles $\partial\boldsymbol{S} = /\partial\boldsymbol{\psi}$ telles que :

$$\mathcal{J}_{i,j} = \frac{\partial S_i}{\partial \psi_j}\,. \tag{C.5}$$

La première ligne de cette matrice est remplie par les dérivées partielles de l'équation d'énergie :

$$\mathcal{J}_{1,j} = \frac{\partial \dot{T}}{\partial \psi_j} \quad j = 1, \ldots, \mathcal{N}_{\text{sp}} - 1\,. \tag{C.6}$$

Les composantes de $\mathcal{J}_{1,j}$ sont donc données par :

$$\mathcal{J}_{1,1} = \frac{\partial S_1}{\partial T} = \frac{-1}{c_p}\sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}}\left[\left(\frac{\partial h_k}{\partial T} - h_k\frac{\partial c_p}{\partial T}\right)\frac{W_k\dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{h_k}{c_p}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{W_k\dot{\omega}_k}{\rho}\right)\right], \tag{C.7}$$

$$\mathcal{J}_{1,j+1} = \frac{\partial S_1}{\partial Y_j} = \frac{-1}{c_p} \sum_{k=1}^{\mathcal{N}_{\text{sp}}} \left[\left(\frac{\partial h_k}{\partial Y_j} - h_k \frac{\partial c_p}{\partial Y_j} \right) \frac{W_k \dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{h_k}{c_p} \frac{\partial}{\partial Y_j} \left(\frac{W_k \dot{\omega}_k}{\rho} \right) \right], \tag{C.8}$$

pour $j = 1, \ldots, \mathcal{N}_{\text{sp}} - 1$. Le remplissage des lignes restantes est assuré par les dérivées partielles des espèces :

$$\mathcal{J}_{k+1,1} = \frac{\partial S_{k+1}}{\partial T} = \frac{W_k}{\rho} \left(\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial T} - \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right), \tag{C.9}$$

$$\mathcal{J}_{k+1,j+1} = \frac{\partial S_{k+1}}{\partial Y_j} = \frac{W_k}{\rho} \left(\frac{\partial \dot{\omega}_k}{\partial Y_j} - \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial Y_j} \right), \tag{C.10}$$

pour $k = 1, \ldots, \mathcal{N}_{\text{sp}} - 1$ et $j = 1, \ldots, \mathcal{N}_{\text{sp}} - 1$. La raideur de l'équation (C.1) peut devenir grande si une ou plusieurs valeurs propres de la matrice Jacobienne $\mathcal{J}$ ont une valeur propre partie réelle négative grande. La plupart des systèmes réactifs font intervenir des phénomènes rapides, avec des variables ayant un temps caractéristique court, mais aussi des phénomènes lents, avec un temps caractéristique plus important. La disparité de ces temps caractéristiques est responsable de la raideur du système différentiel associé (exprimée grossièrement par le rapport entre le temps du processus le plus rapide, et celui le plus lent). La coexistence de dynamiques rapides et lentes pose de nombreuses difficultés aux solveurs numériques utilisant des schémas explicites. En effet, la condition de stabilité impose un pas de temps maximal qui correspond à l'échelle de temps la plus petite du système. L'ensemble de ces raisons conduit les numériciens à utiliser des schémas implicites en temps pour simuler les systèmes EDPs de grande taille évoluant dans le temps. Les schémas implicites les plus communément utilisés sont les schémas de type *Backward Différentiation Formulas* BDF. Le schéma BDF est une méthode multi-pas implicite qui utilise les points connus calculés à différents temps précédents ainsi que la solution inconnue du point courant. L'ordre de précision peut être facilement ajusté en utilisant plus ou moins de points précédents. Cette méthode est connue pour fournir une bonne stabilité pour la résolution de systèmes raides pour laquelle une méthode implicite est indispensable. Une résolution implicite en temps nécessite la résolution à chaque pas de temps d'un système d'équations non linéaire de grande taille qui couple toutes les variables. De plus, la résolution d'un système non linéaire requiert le calcul des matrices Jacobiennes pour chaque pas de temps. Pour la plupart des systèmes, la Jacobienne exacte peut être coûteuse à calculer et difficile à obtenir, par exemple du fait de la taille du modèle chimique et l'utilisation de schémas de discrétisation complexes. La forme générale d'un schéma linéaire multipas est donnée par :

$$\sum_{j=0}^{k} a_j \boldsymbol{\psi}_{n+j} = h \sum_{j=0}^{k} b_j \boldsymbol{S}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{t}_{n+j})), \tag{C.11}$$

où les coefficients $a_0, \cdots, a_k$ et $b_0, \cdots, b_k$ sont des constantes réelles (dans le cas où le pas de temps est fixe). La méthode de BDF est implicite et a la forme suivante :

$$\sum_{j=0}^{k} a_j \boldsymbol{\psi}_{n+j} = h b_k \boldsymbol{S}(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{t}_{n+k})). \tag{C.12}$$

Le solveur CVODE est appelé pratiquement pour chaque point de maillage pour résoudre l'ODE (C.1) avec la composition t_0 et $\Delta t_{\mathtt{CFD}}$ comme argument. Sur la base des valeurs de tolérances spécifiées par l'utilisateur RTOL et ATOL, une valeur initiale du pas de temps $\Delta t_{\mathtt{CFD},1}$ est déterminée. Suivant le mécanisme cinétique du problème, une valeur typique de $\Delta t_{\mathtt{CFD},1}$ se trouve entre 10^{-8} et 10^{-12}. Une méthode de premier ordre est alors utilisée pour procéder à une première estimation de $\boldsymbol{\psi}(t + \Delta t_{\mathtt{CFD},1})$. L'idée générale est donc de poursuivre l'intégration temporelle en utilisant des pas de temps $\Delta t_{\mathrm{ODE},n}$ aussi grand que possible par le solveur pour garder l'ordre k de la méthode jusqu'à atteindre $\Delta t_{\mathtt{CFD}}$, où k et Δt_{ODE} sont choisis pour minimiser le coût total de calcul tout en maintenant la bonne stabilité du schéma et l'ordre de précision de l'utilisateur. Plus précisément, pour faire avancer le calcul du temps t_{n-1} à t_n (tels que $t_n - t_{n-1} = \Delta t_{\mathrm{ODE},n}$, la méthode BDF multi-pas peut être écrite comme :

$$\boldsymbol{\psi}_n = \sum_{i=1}^{k} \left(a_i \boldsymbol{\psi}_{n-i}\right) + \Delta t_{\mathrm{ODE},n} b_0 S_n, \tag{C.13}$$

où les valeurs de $\boldsymbol{\psi}_{n-i}$ sont considérées comme connues à partir des pas de temps précédents. On peut constater à partir de (C.13) que k pas de temps internes sont nécessaires pour calculer le pas de temps actuel. Compte tenu que généralement b_0 est non nul, plusieurs itérations de la méthode de Newton sont effectuées. En effet, on peut réécrire eq. (C.13) à l'itération m de la méthode de Newton comme :

$$\left(\boldsymbol{I} - \Delta t_{\mathrm{ODE},n} b_0 \boldsymbol{J}\right)\left(\boldsymbol{\psi}_{n,m+1} - \boldsymbol{\psi}_{n,m}\right) = -\boldsymbol{R}\left(\boldsymbol{\psi}_{n,m}\right), \tag{C.14}$$

où $\boldsymbol{J}$ est la matrice Jacobienne et $\boldsymbol{R}$ est l'itération-niveau m résiduelle de eq. (C.13) :

$$\boldsymbol{R}\left(\boldsymbol{\psi}_{n,m}\right) = \boldsymbol{\psi}_{n,m} - \sum_{i=1}^{k} \left(a_i \boldsymbol{\psi}_{n-i}\right) - \Delta t_{\mathrm{ODE},n} b_0 S_{n,m}. \tag{C.15}$$

La convergence de la méthode est vérifiée comme suit. Le changement temporel de chaque variable ψ_i à l'itération m est calculé comme $\Delta_{\psi_i,m} = |\psi_{i,m} - \psi_{i,m}|$ et l'erreur est ainsi calculée par :

$$\mathrm{err}_m = \sqrt{\frac{1}{N+1} \sum_{\alpha=1}^{N+1} \left(\frac{\Delta_{\psi_i,m}}{\mathrm{scale}_\alpha}\right)^2}. \tag{C.16}$$

où $\mathrm{scale}_\alpha = \mathrm{ATOL} + |\psi_{i,n,m}|$. La solution converge quand $\mathrm{err} \leq 1$. Si la solution ne converge pas au delà de 3 itérations, le pas $\Delta t_{\mathrm{ODE},n}$ est réduit, le solveur considère cette fois-ci que $k = 1$.

D

Traitement des coins à angle droit

L'application de la méthode des frontières immergées nécessite un traitement spécial pour les coins à angle droit. Pour des raisons de simplicité, ce problème est traité dans le cas 2D considérant un sous-ensemble de 3×3 noeuds, tel qu'affiché sur la Figure D.1. Nous verrons dans cette annexe la procédure d'imposition des conditions frontières sur les points de maillage appartenant à ce sous-ensemble.

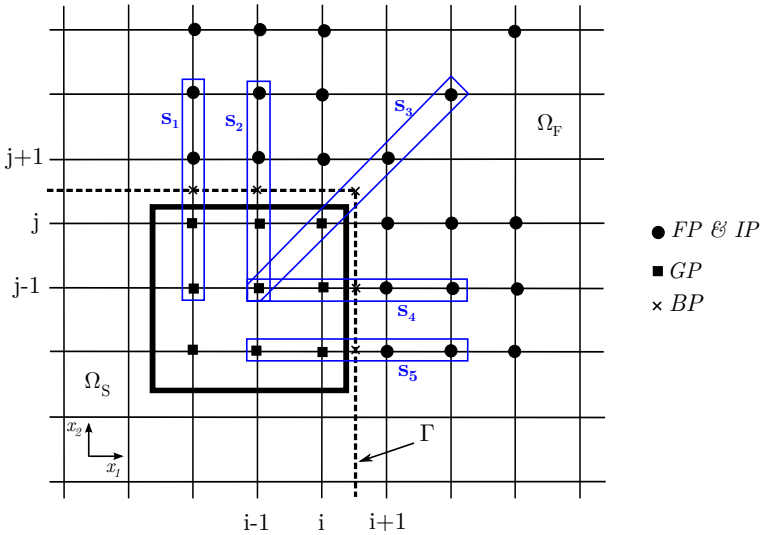


Figure D.1. *Schéma d'une région d'angle à l'intérieur du maillage Cartésien et définition des stencils utilisés pour la procédure d'interpolation (partie 1).*

Considérons une quantité inconnue quelconque ϕ aux noeuds (m,n) avec $m = i-2,\ i-1,\ i$ et $n = j-2,\ j-1,\ j$, nous allons chercher à formuler un ensemble de neuf équations au niveau de ces noeuds permettant d'appliquer la condition aux limites, à titre d'exemple, de type Neumann (un flux nul). Pour chaque stencil $s_i,\ i = 1,2,3,4,5$ défini dans la Figure D.1, la condition limite de flux nul est imposée à ϕ en utilisant le polynôme de Lagrange de troisième ordre $l_{i,3},\ i = 0,\cdots,3$. Pour illustrer cette procédure, nous écrivons pour pour stencil s_1

$$\frac{d\phi}{dn} = \sum_{l=0}^{3} \phi\left(x_{1,i-2}, x_{2,j+l-1}\right) \frac{dl_{l,3}}{dn} \tag{D.1}$$

et pour stencil s_3

$$\frac{d\phi}{dn} = \sum_{l=0}^{3} \phi\left(x_{1,i+l-1}, x_{2,j+l-1}\right) \frac{dl_{l,3}}{dn} \tag{D.2}$$

où $l_{i,3}$ sont les polynômes de base de Lagrange interpolant les 4 points de chaque stencil (voir la Figure D.2). Quatre équations supplémentaires sont nécessaires pour fermer le système d'équations. Elles sont obtenues à l'aide du polynôme de Lagrange $l_{i,4}$, $i = 1, \cdots, 4$ appliqué à chaque stencil s_i, $i = 6,7,8,9$. Par exemple, appliquer cette procédure à s_6 et s_7 conduit à

$$\phi\left(x_{1,i-2}, x_{2,j-1}\right) = \sum_{l=0}^{4} \phi\left(x_{1,i-2}, x_{2,j+l-1}\right) l_{l,4}\left(x_{1,i-2}, x_{2,j-1}\right) \tag{D.3}$$

$$\phi\left(x_{1,i-1}, x_{2,j-1}\right) = \sum_{l=0}^{4} \phi\left(x_{1,i+l-1}, x_{2,j+l-1}\right) l_{l,4}\left(x_{1,i-1}, x_{2,j-1}\right) \tag{D.4}$$

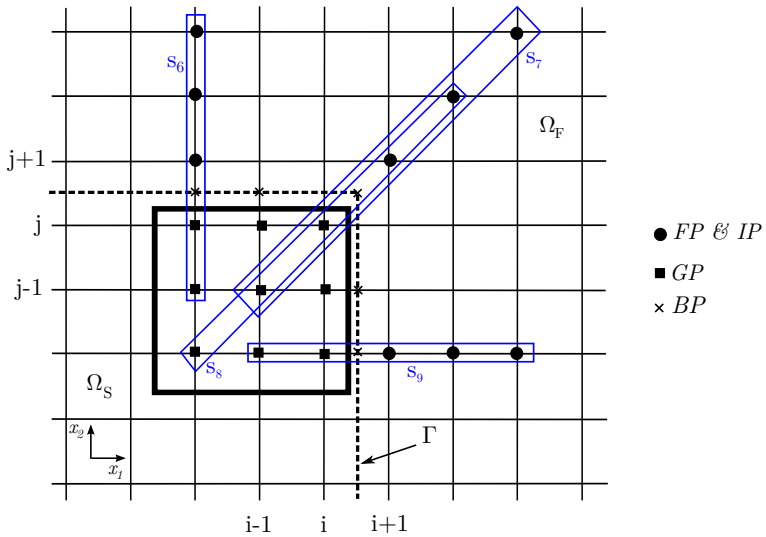


Figure D.2. *Schéma d'une région d'angle à l'intérieur du maillage Cartésien et définition des stencils utilisés pour la procédure d'interpolation (partie 2).*

Puisque nous avons neuf inconnues et neuf équations, le système d'équations peut bien être résolu. Par exemple, imposer une condition aux limites de le cas d'un flux nul (par exemple, condition limite adiabatique), le système à résoudre est $A\Phi = B$ où

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -27 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -27 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 27 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -27 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 27 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix} \tag{D.5}$$

et :

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi_{i-2,j-2} \\ \phi_{i-2,j-1} \\ \phi_{i-2,j} \\ \phi_{i-1,j-3} \\ \phi_{i-1,j-2} \\ \phi_{i-1,j-1} \\ \phi_{i,j-2} \\ \phi_{i,j-1} \\ \phi_{i,j} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -27\phi_{i-1,j+1} + \phi_{i-1,j+2} \\ -27\phi_{i-2,j+1} + \phi_{i-2,j+2} \\ -27\phi_{i+1,j-1} + \phi_{i+2,j-1} \\ -27\phi_{i+1,j-2} + \phi_{i+2,j-2} \\ -27\phi_{i+1,j+1} + \phi_{i+2,j+2} \\ -6\phi_{i+1,j-2} + 4\phi_{i+2,j-2} - \phi_{i+3,j-2} \\ -6\phi_{i-2,j+1} + 4\phi_{i-2,j+2} - \phi_{i-2,j+3} \\ -6\phi_{i+1,j+1} + 4\phi_{i+2,j+2} - \phi_{i+3,j+3} \\ 4\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+2,j+2} \end{bmatrix} \tag{D.6}$$

E

Formalisme de la théorie de l'analyse d'interaction linéaire

Par souci d'exhaustivité et de clarté, nous présentons ici le formalisme de la théorie de l'analyse d'interaction linéaire. Il s'agit d'une théorie consacrée à la prédiction de l'évolution de petites perturbations à la traversée d'un choc. Cette présentation, y compris les notations, s'inspire de celle faite par Mahesh *et al.* [175] (les composante de la vitesse seront notées (u, v, w) et les trois directions d'écoulement (x, y, z)). L'onde de choc est modélisée comme une discontinuité sous forme d'un plan. L'écoulement est décomposé en une partie moyenne et une partie fluctuante. Cette dernière est supposée être faible, de sorte que l'écoulement moyen obéit aux conditions de Rankine-Hugoniot, alors que les fluctuations peuvent être linéarisées. La théorie LIA permet de déterminer entièrement l'état aval et la dynamique de choc seulement en connaissant l'état de l'écoulement. Elle utilise la décomposition de Kovasznay [147] selon laquelle les équations linéarisées d'un écoulement turbulent se décomposent en trois modes de fluctuations :

- les perturbations linéaires de pression ;
- les perturbations d'entropie ;
- les perturbations de vorticité.

Les non-linéarités des équations de Navier-Stokes peuvent ensuite être vues comme des interactions entre ces modes. En plus, tous les modes de Kovasznay [147] évoluent indépendamment suivant l'approximation de faibles fluctuations et l'interaction de chaque mode avec l'onde de choc peut être étudiée indépendamment. L'intégration de ces trois modes individuels décrit de façon complète les statistiques de l'écoulement turbulent [232]. Les états amont (indexé par $_1$) et aval (indexé par $_2$) d'écoulement sont reliés par les relations de Rankine-Hugoniot. Celles-ci sont données par

$$\begin{cases} \rho_1 v_1 = \rho_2 v_2, & \text{(E.1a)} \\ P_1 + \rho_1 v_1^2 = P_2 + \rho_2 v_2^2, & \text{(E.1b)} \\ \dfrac{1}{2} v_1^2 + \dfrac{\gamma P_1}{(\gamma - 1)\rho_1} = \dfrac{1}{2} v_2^2 + \dfrac{\gamma P_2}{(\gamma - 1)\rho_2} & \text{(E.1c)} \end{cases}$$

L'écoulement moyen stationnaire est supposé être dans le sens positif de x et il est caractérisé

par sa densité $\overline{\rho}$, sa pression $\overline{p}$, et par la vitesse moyenne longitudinale de vitesse U_1. Le champ de perturbation amont est constitué :

1. de modes de vorticité, modélisés par une onde de cisaillement plane avec un nombre d'onde $(\kappa m, \kappa l)$ et une fréquence angulaire $\kappa m U_1$,

$$\begin{cases} \dfrac{u_1'}{U_1} = l A_v e^{i\kappa(mx+ly-U_1 mt)}, & \text{(E.2a)} \\ \dfrac{v_1'}{U_1} = -m A_v e^{i\kappa(mx+ly-U_1 mt)}, & \text{(E.2b)} \end{cases}$$

2. de modes entropiques, modélisés par une onde sinusoïdale plane de même nombre d'ondes et de même fréquence,

$$\begin{cases} \dfrac{\rho_1'}{\overline{\rho_1}} = A_e e^{i\kappa(mx+ly-U_1 mt)}, & \text{(E.3a)} \\ \dfrac{T_1'}{\overline{T_1}} = -\dfrac{\rho_1'}{\overline{\rho_1}}, & \text{(E.3b)} \end{cases}$$

où $m = \cos\Psi_1$ et $l = \sin\Psi_1$ et est l'angle entre l'axe x et la direction de propagation de la perturbation incidente. Les quantités u_1' et v_1' sont les composantes x et y des fluctuations de vitesse, tandis que A_v et A_e sont les amplitudes des ondes de vorticité et d'entropie incidentes. Les quantités ρ_1' et T_1' sont les perturbations de densité et de température. On ignore ici les ondes acoustiques dans la région de pré-choc, ce qui correspond à l'hypothèse d'une fluctuation nulle de la pression. Lorsque les perturbations en amont interagissent avec le choc, le premier mode réagit en changeant sa position et sa forme. Selon la théorie LIA, pour une perturbation ayant pour équations (E.2) et (E.3), la surface de choc se déforme en une onde sinusoïdale se propageant dans la direction y :

$$\xi(y,t) = -\frac{L}{i\kappa m} e^{i\kappa(ly-U_1 mt)}, \tag{E.4}$$

où $\xi(y,t)$ est l'abscisse de la position de choc en ordonnée y à l'instant t. L est une grandeur qui caractérise l'amplitude des oscillations de choc. La vitesse instantanée ξ_t et l'inclinaison ξ_y sont données par :

$$\begin{cases} \xi_t(t,y) = U_1 L e^{i\kappa(ly-U_1 mt)}, & \text{(E.5a)} \\ \xi_y(t,y) = -\dfrac{l}{m} L e^{i\kappa(ly-U_1 mt)}. & \text{(E.5b)} \end{cases}$$

L'interaction des ondes de vorticité et d'entropie avec le choc génère un champ de perturbation en aval constitué de la vorticité, de l'entropie et des ondes sonores [175, 174] :

$$\begin{cases} \dfrac{u_2'}{U_1} = Fe^{i\tilde{\kappa}x}e^{i\kappa(ly-U_1mt)} + Ge^{i\kappa(\mathcal{C}mx+ly-U_1mt)}, & \text{(E.6a)} \\ \dfrac{v_2'}{U_1} = He^{i\tilde{\kappa}x}e^{i\kappa(ly-U_1mt)} + Ie^{i\kappa(\mathcal{C}mx+ly-U_1mt)}, & \text{(E.6b)} \\ \dfrac{P_2'}{\overline{P_1}} = Ke^{i\tilde{\kappa}x}e^{i\kappa(ly-U_1mt)}, & \text{(E.6c)} \\ \dfrac{\rho_2'}{\overline{\rho_1}} = \dfrac{K}{\gamma}e^{i\tilde{\kappa}x}e^{i\kappa(ly-U_1mt)} + Qe^{i\kappa(\mathcal{C}mx+ly-U_1mt)}, & \text{(E.6d)} \end{cases}$$

La représentation schématique de ce processus est donnée à la Figure E.1. Les coefficients F,

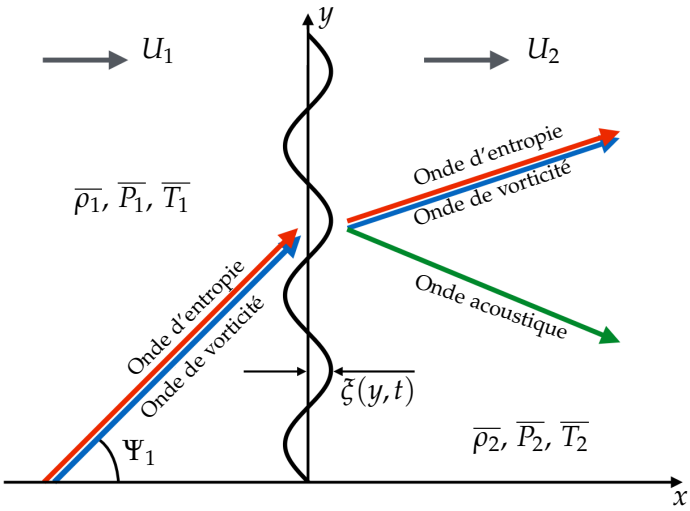


Figure E.1. *Représentation schématique de l'interaction d'une onde d'entropie et/ou de vorticité avec une onde de choc dans le contexte du formalisme LIA. La position moyenne du choc est alignée sur l'axe y et l'écoulement moyen est dans la direction x positive. L'écoulement moyen amont est caractérisé par la vitesse U_1, la densité $\overline{\rho_1}$, la pression $\overline{P_1}$ et la température $\overline{T_1}$, tandis que les quantités aval correspondantes sont U_2, $\overline{\rho_2}$, $\overline{P_2}$ et $\overline{T_2}$. Lorsque les ondes de tourbillon et/ou d'entropie de forme (E.2)-(E.3) entre en interaction avec une onde de choc, cette dernière réagit en changeant sa position et sa forme. Dans le cadre de LIA, pour de telles perturbations, la surface de choc se déforme en une onde plane sinusoïdale se propageant dans la direction y décrite par l'équation (E.4). Le champ de perturbation en aval est constitué d'entropie, de vorticité et d'ondes acoustiques données par le système (E.6).*

H et K sont les amplitudes de la composante acoustique, tandis que les coefficients G, I et Q sont associés aux composantes d'entropie et de vorticité. Les deux premiers composantes ont le même vecteur nombre d'onde $(m\mathcal{C}\kappa, l\kappa)$ et la fréquence angulaire $\kappa m U_1$. $\mathcal{C}$ est le rapport de des masses volumiques amont et aval $\overline{\rho_2}/\overline{\rho_1}$. La composante acoustique a la même fréquence angulaire mais un nombre d'onde différent $(\tilde{\kappa}, l\kappa)$. Afin d'obtenir ce dernier, nous écrivons l'équation d'onde pour la pression dans la région post-choc [175] :

$$P_{tt}' + 2U_2P_{xt}' - (c_{s,2}^2 - U_2^2)P_{xx}' - c_s^2P_{yy}' = 0, \tag{E.7}$$

où $c_{c,2}$ est la vitesse du son. La solution dans la région de post-choc doit avoir la même fréquence et le même nombre d'onde transversal que la perturbation en amont. Ainsi, la forme générale de la solution de l'équation (E.7) est :

$$p' = F(x)e^{i\kappa(ly - mU_1 t)}. \tag{E.8}$$

En supposant que $F(x) \propto e^{\widetilde{\kappa}x}$ et en substituant cela dans l'équation (E.7), on obtient une équation quadratique pour κ :

$$\left[\frac{c_{s,2}^2}{U_1^2} - \frac{U_2^2}{U_1^2}\right]\widetilde{\kappa}^2 + 2m\frac{U_2}{U_1}\widetilde{\kappa} - \kappa^2\left[m^2 - l^2\frac{c_{s,2}^2}{U_1^2}\right] = 0. \tag{E.9}$$

Le discriminant de l'équation (E.9) est réel si $\Psi_1 < \Psi_c$ et complexe si $\Psi_1 > \Psi_c$, où l'angle critique Ψ_c est donné par :

$$\Psi_c = \cot^{-1}\sqrt{\frac{c_{s,2}^2}{U_1^2} - \frac{U_2^2}{U_1^2}}. \tag{E.10}$$

Pour $\Psi_1 < \Psi_c$, $\widetilde{\kappa}$ est réel et donné par :

$$\frac{\widetilde{\kappa}}{\kappa} = \frac{U_1}{U_2}\frac{M_2}{1 - M_2^2}\left[-mM_2 + l\sqrt{\frac{m^2}{l^2} - \frac{U_2^2}{U_1^2}\left(\frac{1}{M_2^2} - 1\right)}\right]. \tag{E.11}$$

Dans ce régime, la solution représente une simple onde sonore sinusoïdale plane. Pour $\Psi_1 > \Psi_c$, $\widetilde{\kappa}$ est complexe, $\widetilde{\kappa} = \widetilde{\kappa}_r + i\widetilde{\kappa}_i$:

$$\begin{cases} \dfrac{\widetilde{\kappa}_r}{\kappa} = -m\dfrac{U_1}{U_2}\dfrac{M_2^2}{1 - M_2^2}, & \text{(E.12a)} \\ \dfrac{\widetilde{\kappa}_i}{\kappa} = l\dfrac{U_1}{U_2}\dfrac{M_2^2}{1 - M_2^2}\sqrt{\dfrac{m^2}{l^2} - \dfrac{U_2^2}{U_1^2}\left(\dfrac{1}{M_2^2} - 1\right)}. & \text{(E.12b)} \end{cases}$$

Ceci décrit une onde sonore plan à amortissement exponentiel. Nous tâcherons maintenant de trouver les amplitudes de la solution post-choc. Nous commençons par les équations d'Euler linéarisées pour le champ de perturbation [175] :

$$\begin{cases} u'_t + U_2 u'_x = -\dfrac{1}{\widetilde{\rho}}P'_x, & \text{(E.13a)} \\ v'_t + U_2 v'_x = -\dfrac{1}{\widetilde{\rho}}P'_y. & \text{(E.13b)} \end{cases}$$

En substituant la partie acoustique de la solution (E.6) dans l'équation de la quantité de mouvement dans la direction x (E.13a), on obtient :

$$U_1(-Fi\kappa mU_1) + U_2U_1Fi\widetilde{\kappa} = -\frac{1}{\rho_2}Ki\widetilde{\kappa}, \tag{E.14}$$

qui permet d'écrire :

$$F = \alpha K, \text{ avec } \alpha = \frac{c_{s,2}^2}{\gamma U_1^2} \frac{\frac{\widetilde{\kappa}}{\kappa}}{m - \frac{\widetilde{\kappa}}{\widetilde{\kappa}_r}}. \tag{E.15}$$

De manière analogue, les équations de quantité de mouvements suivant y donnent :

$$H = \beta K, \text{ avec } \beta = \frac{c_{s,2}^2}{\gamma U_1^2} \frac{l}{m - \frac{\widetilde{\kappa}}{\widetilde{\kappa}_r}}. \tag{E.16}$$

Pour les ondes de vorticité, le champ de vitesse doit être solénoïdale :

$$U_1 G i\kappa + U_1 I i\kappa l = 0, \tag{E.17}$$

d'où l'on tire :

$$I = -\frac{mr}{l} G. \tag{E.18}$$

Les conditions de Rankine-Hugoniot donnent les équations suivantes pour le champ de perturbation en aval du choc :

$$\begin{cases} \dfrac{u_2' - \xi_t}{U_1} = B_1 \dfrac{u_1' - \xi_t}{U_1} + B_2 \dfrac{T_1'}{\overline{T_1}}, & \text{(E.19a)} \\ \dfrac{\rho_2'}{\overline{\rho_2}} = C_1 \dfrac{u_1' - \xi_t}{U_1} + C_2 \dfrac{T_1'}{\overline{T_1}}, & \text{(E.19b)} \\ \dfrac{p_2'}{\overline{P_2}} = D_1 \dfrac{u_1' - \xi_t}{U_1} + D_2 \dfrac{T_1'}{\overline{T_1}}, & \text{(E.19c)} \\ \dfrac{v_2'}{U_1} = \dfrac{v'}{U_1} + E_1 \xi_y, & \text{(E.19d)} \\ & \text{(E.19e)} \end{cases}$$

où A, B, C D et E sont fonction du nombre de Mach amont M_1. En substituant la solution en aval du choc (E.6) à ces équations, on obtient un système d'équations algébriques pour les amplitudes de cette solution :

$$\begin{cases} F + g - L = B_1(lA_v - L) - B_2 A_e, & \text{(E.20a)} \\ \dfrac{K}{\gamma} + Q = C_1(lA_v - L) - C - 2A_e, & \text{(E.20b)} \\ K = D_1(lA_v - L) - D_2 A_e, & \text{(E.20c)} \\ H + I = -mA_v - E_1 \dfrac{l}{m} L. & \text{(E.20d)} \end{cases}$$

Nous normalisons les amplitudes de la solution (E.6) avec l'amplitude de l'onde de vorticité incidente A_v (c'est-à-dire $\widetilde{F} = F/A_v$, $\widetilde{L} = L/A_v$, etc.). Nous réécrivons le système ci-dessus

(E.20) en utilisant ces coefficients :

$$\begin{cases} \widetilde{F} = \alpha \widetilde{K}, & \text{(E.21a)} \\ \widetilde{H} = \beta \widetilde{K}, & \text{(E.21b)} \\ \widetilde{F} + \widetilde{G} - \widetilde{L} = B_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - B_2 \dfrac{A_e}{A_v}, & \text{(E.21c)} \\ \dfrac{\widetilde{K}}{\gamma} + \widetilde{Q} = C_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - C_2 \dfrac{A_e}{A_v}, & \text{(E.21d)} \\ \widetilde{K} = D_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - D_2 \dfrac{A_e}{A_v}, & \text{(E.21e)} \\ \widetilde{H} + \widetilde{I} = -m - E_1 \dfrac{l}{m} \widetilde{L}. & \text{(E.21f)} \end{cases}$$

La solution de ce système (E.22) est la suivante :

$$\widetilde{L} = \frac{-m - \beta \left(D_1 l - D_2 \frac{A_e}{A_v} \right)}{E_1 \frac{l}{m} - 1 - \frac{mr}{l} \left(1 - B_1 + 1 \right)} + \frac{\frac{mr}{l} \left[-\alpha \left(D_1 l - D_2 \frac{A_e}{A_v} \right) + B_1 l - B_2 \frac{A_e}{A_v} \right]}{E_1 \frac{l}{m} - \beta D_1 - \frac{mr}{l} \left(1 - B_1 + \alpha D_1 \right)}, \tag{E.22a}$$

$$\widetilde{I} = -\frac{mr}{l} \left[\left(1 - B_1 + \alpha D_1 \right) \widetilde{L} - \alpha \left(D_1 l - D_2 \frac{A_e}{A_v} \right) + B_1 l - B_2 \frac{A_e}{A_v} \right], \tag{E.22b}$$

$$\widetilde{G} = \widetilde{L} \left(1 - B_1 + \alpha D_1 \right) - \alpha \left(D_1 l - D_2 \frac{A_e}{A_v} \right) + B_1 l - B_2 \frac{A_e}{A_v}, \tag{E.22c}$$

$$\widetilde{K} = D_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - D_2 \frac{A_e}{A_v}, \tag{E.22d}$$

$$\widetilde{F} = \alpha D_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - \alpha D_2 \frac{A_e}{A_v}, \tag{E.22e}$$

$$\widetilde{H} = \beta \left(D_1 l - D_2 \frac{A_e}{A_v} \right) - \beta D_1 \widetilde{L}, \tag{E.22f}$$

$$\widetilde{Q} = C_1 \left(l - \widetilde{L} \right) - C_2 \frac{A_e}{A_v} - \frac{D_1}{\gamma} \left(l - \widetilde{L} \right) + \frac{D_2}{\gamma} \frac{A_e}{A_v}. \tag{E.22g}$$

On note que la solution dépend du nombre de Mach amont M_1 de l'écoulement moyen et du rapport des amplitudes de l'entropie amont et des ondes de vorticité A_e / A_v. On note également qu'aucune des fonctions d'amplitude ne dépend du nombre d'onde κ des ondes incidentes, donc la solution LIA est invariante par rapport à l'échelle spatiale des perturbations intéragissant avec le choc.

F

Génération du champ scalaire fluctuant

Nous allons décrire dans cette annexe l'approche utilisée pour générer le champ scalaire fluctuant initial. Le principe de cette méthode consiste à initialiser le champ scalaire suivant une densité de probabilité $P^{\xi}(y)$ donnée, associé à un champ scalaire $\xi(\boldsymbol{x})$ borné. Cela nécessite une information spatiale, qui est déterminée à l'aide d'un autre champ $Z(\boldsymbol{x})$ (non borné), initialisé par la donnée d'un spectre $E_Z(\boldsymbol{\kappa})$. La procédure de génération est à quatre étapes :

1. tout d'abord, un champ scalaire turbulent non borné $Z(\boldsymbol{x})$ est généré grâce au spectre donné $E_Z(\kappa)$;
2. la deuxième étape consiste à ordonner les positions de l'espace, selon l'ordre des valeurs du champ Z ;
3. une troisième étape est de construire une série ordonnée de valeurs (ξ), respectant la forme la densité de probabilité souhaitée ;
4. ensuite, les valeurs du scalaire ξ étant ordonnées, elle sont affectées à des positions correspondant aux valeurs ordonnées du scalaire Z, le champ $\xi(\boldsymbol{x})$, ainsi construit, suit une cohérence spatiale du champ $Z(\boldsymbol{x})$.

L'initialisation du champ $Z(\boldsymbol{x})$ est analogue à celle retenue pour une composante du champ de vitesse. Nous supposons une norme parfaitement isotrope pour $\widehat{Z}(\boldsymbol{\kappa})$:

$$E_Z(\kappa) = \alpha_1 \kappa^2 \widehat{Z}(\boldsymbol{\kappa}) \widehat{Z}^*(\boldsymbol{\kappa}) \frac{\Delta V_k}{\pi^2}, \tag{F.1}$$

V étant le volume physique du domaine de simulation et ΔV_k un élément de volume et $\alpha_1 = \pi/4$ en 2D et $\alpha_2 = 1/4$ en 3D. Le champ $\widehat{Z}(\boldsymbol{\kappa})$ est construit par le biais de la relation :

$$\widehat{Z} = \sqrt{\frac{4\pi\alpha_2 E_z(\kappa)}{k\Delta V_k}} e^{i\theta}, \tag{F.2}$$

où $\alpha_2 = 1$ en 2D et $\alpha_2 = \pi$ en 3D ; la phase θ est choisie aléatoirement dans l'intervalle $[0, 2\pi]$. Le champ $\widehat{Z}$ dans le domaine spectral est transformé à l'espace physique grâce à la transformée de Fourier. Le domaine physique est discrétisé en N éléments de volume ΔV_i, associé à $N = \prod_{i=1}^{\dim} N_i$ nœuds de maillage (N_i est le nombre de nœuds dans chaque direction

i). Ces nœuds sont "pointés" par l'indice général k. Cependant, si i_1, i_2 et i_3 correspondent à la position d'un nœud dans un maillage 3D, k est défini par $k = i_1 + (i_2 - 1)N_1 + (i_3 - 1)N_1N_2$. Dans un tableau I de N éléments sont rangés les index k tels que :

$$Z_{I(l)} \leq Z_{I(l+1)}, \quad \forall l \in [\![0, N-1]\!]. \tag{F.3}$$

L'étape suivante consiste à établir une série croissante de N valeurs $\xi_{I(l)}$, associées aux éléments de volume $\Delta V_{I(l)}$, qui vérifie la densité de probabilité. Avec une statistique spatiale, la fonction de distribution $F^{\xi}(y)$ s'identifie à la fraction de volume pour laquelle le champ de $\xi(x)$ a ses valeurs inférieures à y. En notant $\chi(y)$ cette fraction de volume, elle est alors définie par :

$$\chi(y) = \int_0^y P^{\xi}(y)\mathrm{d}y = F^{\xi}(y). \tag{F.4}$$

Ainsi, la valeur de y prise par le champ ξ se déduit en inversant cette relation. La fraction de volume discrète est définie, par exemple avec une relation centrée ; V étant le volume du domaine :

$$\chi_{I(1)} = \frac{1}{2V}\Delta V_{I(1)}, \quad \chi_{I(l)} = \chi_{I(l-1)} + \frac{1}{2V}\left(\Delta V_{I(l-1)} + \Delta V_{I(l)}\right), \quad l = 1, 2, \cdots, N, \tag{F.5}$$

ou encore, dans le cas particulier d'une discrétisation uniforme $\chi_{I(l)} = (2l-1)/2N$, $l = 1, 2, \cdots, N$. Ensuite, la champ ξ s'obtient directement, à l'aide de la fonction de distribution $\xi_i = (F^{\xi})^{-1}(\chi_i)$. Ce processus d'initialisation suppose une valeur uniforme de scalaire sur chaque élément de volume. À partir du champ scalaire obtenu, nous pouvons ainsi vérifier

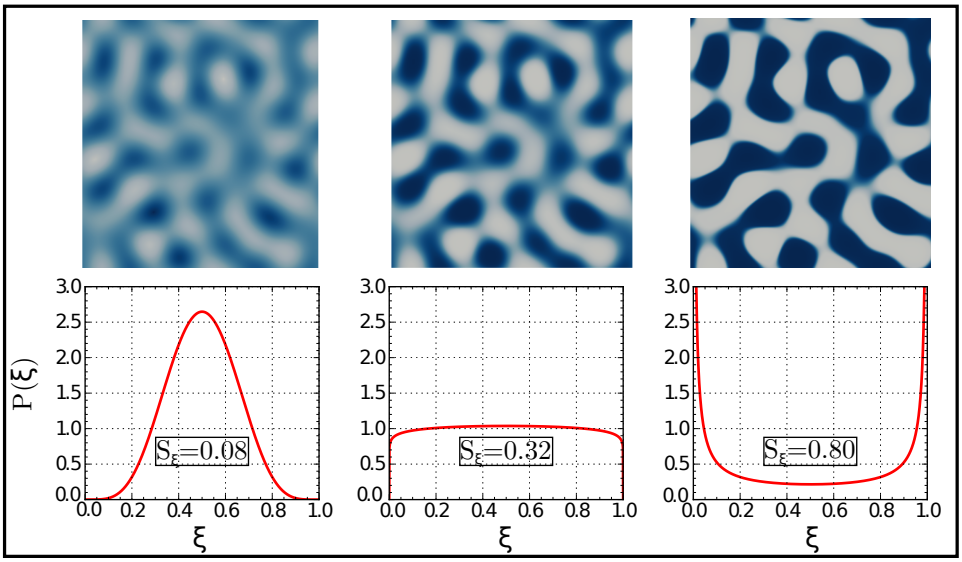


Figure F.1. *Champ scalaire généré pour trois niveaux de ségrégation d'une initialisation bidimensionnelle.*

que la fonction de distribution est généralement bien respectée (dans la mesure ou le champ ne présente pas de gradients trop importants). Plus précisément, si la fonction de distribution

est reconstruite avec une méthode d'ordre zéro, nous retrouvons exactement la forme prescrite initialement.

La Figure F.1 représente un champ scalaire généré à partir d'un même spectre pour des niveaux niveaux de ségrégations S_ξ. Le champ scalaire est ensuite lissé en résolvant l'équation de diffusion, jusqu'à ce que les gradients scalaires se soient bien résolus sur le maillage.

Bibliographie

[1] J. H. Agui, G. Briassulis et Y. Andreopoulos : Studies of interactions of a propagating shock wave with decaying grid turbulence: velocity and vorticity fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 524:143–195, 2005.

[2] M. Al-Marouf et R. Samtaney : A versatile embedded boundary adaptive mesh method for compressible flow in complex geometry. *Journal of Computational Physics*, 337:339–378, 2017.

[3] Y. Andreopoulos, J. H. Agui et G. Briassulis : Shock wave—turbulence interactions. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32:309–345, 2000.

[4] P. Angot, C. H. Bruneau et P. Fabrie : A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81:497–520, 1999.

[5] E. Arquis et J. P. Caltagirone : Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieu poreux: application à la convection naturelle. *CR Acad. Sci. Paris II*, 299:1–4, 1984.

[6] Wm. T. Ashurst, A. R. Kerstein, R. M. Kerr et C. H. Gibson : Alignment of vorticity and scalar gradient with strain rate in simulated Navier–Stokes turbulence. *The Physics of Fluids*, 30:2343–2353, 1987.

[7] K. E. Atkinson : *An introduction to numerical analysis*. John Wiley & Sons, 2008.

[8] B. Auvity, S. Barre et J. P. Bonnet : Experimental study of a normal shock/homogeneous turbulence interaction. *In ASME 2002 Joint US-European Fluids Engineering Division Conference*, pages 1089–1095, 2002.

[9] F. Bahmani et M. S. Cramer : Suppression of shock-induced separation in fluids having large bulk viscosities. *Journal of Fluid Mechanics*, 756, 2014.

[10] A. B. Bailey et J. Hiatt : Sphere drag coefficients for a broad range of Mach and Reynolds numbers. *AIAA Journal*, 10:1436–1440, 1972.

[11] D. S. Balsara et C. W. Shu : Monotonicity preserving weighted essentially non-oscillatory schemes with increasingly high order of accuracy. *Journal of Computational Physics*, 160:405–452, 2000.

[12] S. Barre, D. Alem et J. P. Bonnet : Experimental study of a normal shock/homogeneous turbulence interaction. *AIAA Journal*, 34, 1996.

[13] G. K. Batchelor : *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2000.

[14] M. Baum, T. Poinsot et D. Thévenin : Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. *Journal of Computational Physics*, 116:247–261, 1995.

[15] R. Betchov : An inequality concerning the production of vorticity in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 1:497–504, 1956.

[16] R. P. Beyer et R. J. LeVeque : Analysis of a one-dimensional model for the immersed boundary method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29:332–364, 1992.

[17] G. Billet, V. Giovangigli et G. De Gassowski : Impact of Volume Viscosity on a Shock–Hydrogen-Bubble Interaction. *Combustion Theory and Modelling*, 12(2):221–248, 2008.

[18] F. S. Billig : Shock-wave shapes around spherical-and cylindrical-nosed bodies. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 4:822–823, 1967.

[19] G. A. Blaisdell, N. N. Mansour et W. C. Reynolds : Compressibility effects on the growth and structure of homogeneous turbulent shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 256:443–485, 1993.

[20] R. Bobenrieth Miserda, A. L. Maldonado, B. Pimenta et R. Queiroz : Simulation of the Cascade-Gust Interaction Problem Using a High-Order Immersed Boundary Method. *In 16th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, page 3889, 2010.

[21] C. Bogey : *Calcul direct du bruit aérodynamique et validation de modèles acoustiques hybrides*. Thèse de doctorat, École centrale de Lyon, 2000.

[22] O. Boiron, G. Chiavassa et R. Donat : A high-resolution penalization method for large Mach number flows in the presence of obstacles. *Computers & Fluids*, 38:703–714, 2009.

[23] O. N. Boratav, S. E. Elghobashi et R. Zhong : On the alignment of strain, vorticity and scalar gradient in turbulent, buoyant, nonpremixed flames. *Physics of Fluids*, 10:2260–2267, 1998.

[24] I. Borazjani, L. Ge et F. Sotiropoulos : Curvilinear immersed boundary method for simulating fluid structure interaction with complex 3D rigid bodies. *Journal of Computational physics*, 227:7587–7620, 2008.

[25] R. Borghi : Turbulent combustion modelling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 14:245–292, 1988.

[26] R. Boukharfane, Z. Bouali et A. Mura : Direct numerical simulations of shock-scalar mixing interaction. *In Proceedings of 25th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*. ICDERS, 2017.

[27] R. Boukharfane, Z. Bouali et A. Mura : Evolution of scalar and velocity dynamics in planar shock-turbulence interaction. *Shock Waves*, 2018.

[28] R. Boukharfane, B. Bouvelle, Z. Bouali et A. Mura : An Immersed Boundary Method to Simulate Compressible Reactive Flows featuring Shock-Wave Interactions with Three-Dimensional Solid Obstacles. *In Proceedings of 25th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS)*. ICDERS, 2015.

[29] R. Boukharfane, P. J. Martinez-Ferrer, A. Mura et V. Giovangigli : On the role of bulk viscosity in compressible reactive shear layer developments. *In Proceedings of 10th International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD)*. ICCFD, 2018.

[30] R. Boukharfane, F. H. E. Ribeiro, Z. Bouali et A. Mura : A combined ghost-point-forcing/direct-forcing immersed boundary method (IBM) for compressible flow simulations. *Computers & Fluids*, 162:91–112, 2018.

[31] G. Brethouwer, J. C. R. Hunt et F. T. M. Nieuwstadt : Micro-structure and Lagrangian statistics of the scalar field with a mean gradient in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 474:193–225, 2003.

[32] T. T. Bringley et C. S. Peskin : Validation of a simple method for representing spheres and slender bodies in an immersed boundary method for Stokes flow on an unbounded domain. *Journal of Computational Physics*, 227:5397–5425, 2008.

[33] A. E. Bryson et R. W. F. Gross : Diffraction of strong shocks by cones, cylinders, and spheres. *Journal of Fluid Mechanics*, 10:1–16, 1961.

[34] K. A. Buch et W. J. A. Dahm : Experimental study of the fine-scale structure of conserved scalar mixing in turbulent shear flows. Part 1. $Sc \geq 1$. *Journal of Fluid Mechanics*, 317:21–71, 1996.

[35] K. A. Buch et W. J. A. Dahm : Experimental study of the fine-scale structure of conserved scalar mixing in turbulent shear flows. Part 2. $Sc \approx 1$. *Journal of Fluid Mechanics*, 364:1–29, 1998.

[36] R. Buttay : *Etude de l'interaction choc/turbulence/combustion en écoulement cisaillé réactif: analyse des jets réactifs fortement sous-détendus.* Thèse de doctorat, ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers, 2015.

[37] R. Buttay, G. Lehnasch et A. Mura : Turbulent mixing and molecular transport in highly under-expanded hydrogen jets. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018.

[38] O. R. H. Buxton et B. Ganapathisubramani : Amplification of enstrophy in the far field of an axisymmetric turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 651:483–502, 2010.

[39] S. Candel : Mécanique des fluides. *DUNOD (Paris, 1990)*, 1990.

[40] Y. A. Cengel et M. A. Boles : *Thermodynamics: An Engineering Approach*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 2014.

[41] N. Chakraborty, M. Champion, A. Mura et N. Swaminathan : Scalar dissipation rate approach. *In Turbulent Premixed Flames 1st Edition*. Cambridge University Press, 2011.

[42] S. M. Chang et K. S. Chang : On the shock–vortex interaction in Schardin's problem. *Shock Waves*, 10:333–343, 2000.

[43] C. J. Chapman : *High speed flow*, volume 23. Cambridge University Press, 2000.

[44] S. Chapman et T. G. Cowling : *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases*. Cambridge university press, 1970.

[45] S. Chapman, T. G. Cowling et D. Park : The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. *American Journal of Physics*, 30(5):389–389, 1962.

[46] P. Chassaing : Turbulence en mécanique des fluids: Analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur, 2000.

[47] P. Chassaing : *Mécanique des fluides*. Cepadues éditions, 2010.

[48] A. Chaudhuri, A. Hadjadj et A. Chinnayya : On the use of immersed boundary methods for shock/obstacle interactions. *Journal of Computational Physics*, 230:1731–1748, 2011.

[49] T. S. Cheng, J. A. Wehrmeyer, R. W. Pitz, O. Jarrett et G. B. Northam : Raman measurement of mixing and finite-rate chemistry in a supersonic hydrogen-air diffusion flame. *Combustion and Flame*, 99 (1):157–173, 1994.

[50] Jung J. Choi : Hybrid spectral difference/embedded finite volume method for conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 295:285–306, 2015.

[51] M. S. Chong, A. E. Perry et B. J. Cantwell : A general classification of three-dimensional flow fields. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2:765–777, 1990.

[52] S. Clain, S. Diot et R. Loubere : A high-order finite volume method for systems of conservation laws—Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). *Journal of Computational Physics*, 230:4028–4050, 2011.

[53] D. K. Clarke, H. A. Hassan et M. D. Salas : Euler calculations for multielement airfoils using Cartesian grids. *AIAA Journal*, 24:353–358, 1986.

[54] M. S. Cramer : Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases. *Physics of Fluids*, 24(6):066102, 2012.

[55] C. F. Curtiss et J. O. Hirschfelder : Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 17(6):550–555, 1949.

[56] H. Dammertz et A. Keller : Improving ray tracing precision by object space intersection computation. *In Interactive Ray Tracing 2006, IEEE Symposium on*, pages 25–31. IEEE, 2006.

[57] T. Davidovič, T. Engelhardt, I. Georgiev, P. Slusallek et C. Dachsbacher : 3D rasterization: a bridge between rasterization and ray casting. *In Proceedings of Graphics Interface 2012*, pages 201–208. Canadian Information Processing Society, 2012.

[58] P. Davidson : *Turbulence: an introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, USA, 2015.

[59] T. De Karman et L. Howarth : On the statistical theory of isotropic turbulence. *In Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 164, pages 192–215, 1938.

[60] M. D. De Tullio, P. De Palma, G. Iaccarino, G. Pascazio et M. Napolitano : An immersed boundary method for compressible flows using local grid refinement. *Journal of Computational Physics*, 225:2098–2117, 2007.

[61] P. J. Diamessis et K. K. Nomura : Interaction of vorticity, rate-of-strain, and scalar gradient in stratified homogeneous sheared turbulence. *Physics of Fluids*, 12:1166–1188, 2000.

[62] H. Ding, C. Shu, K. S. Yeo et D. Xu : Numerical simulation of flows around two circular cylinders by mesh-free least square-based finite difference methods. *International Journal for Numerical methods in Fluids*, 53:305–332, 2007.

[63] D. A. Donzis : Similarity scaling in shock-turbulence interactions. *In APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts*, 2010.

[64] D. A. Donzis : Shock structure in shock-turbulence interactions. *Physics of Fluids*, 24:126101, 2012.

[65] E. Dresselhaus et M. Tabor : The kinematics of stretching and alignment of material elements in general flow fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 236:415–444, 1992.

[66] D. Drikakis, D. Ofengeim, E. Timofeev et P. Voionovich : Computation of non-stationary shock-wave/cylinder interaction using adaptive-grid methods. *Journal of Fluids and Structures*, 11:665–692, 1997.

[67] J. Du, C. W. Shu et M. Zhang : A simple weighted essentially non-oscillatory limiter for the correction procedure via reconstruction (CPR) framework. *Applied Numerical Mathematics*, 95:173–198, 2015.

[68] P. Dupont, C. Haddad, J. P. Ardissone et J. F. Debieve : Space and time organisation of a shock wave/turbulent boundary layer interaction. *Aerospace Science and Technology*, 9:561–572, 2005.

[69] J. P. Dussauge, P. Dupont et J. F. Debiève : Unsteadiness in shock wave boundary layer interactions with separation. *Aerospace Science and Technology*, 10:85–91, 2006.

[70] J. L. Ellzey, M. R. Henneke, J. M. Picone et E. S. Oran : The interaction of a shock with a vortex: shock distortion and the production of acoustic waves. *Physics of Fluids*, 7:172–184, 1995.

[71] G. E. Elsinga et I. Marusic : Universal aspects of small-scale motions in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 662:514–539, 2010.

[72] G. Emanuel : Bulk viscosity of a dilute polyatomic gas. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 2(12):2252–2254, 1990.

[73] G. Emanuel : Effect of bulk viscosity on a hypersonic boundary layer. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4(3):491–495, 1992.

[74] A. F. Emery : An evaluation of several differencing methods for inviscid fluid flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2:306–331, 1968.

[75] G. Erlebacher, M. Y. Hussaini, H. O. Kreiss et S. Sarkar : The analysis and simulation of compressible turbulence. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2:73–95, 1990.

[76] A. Ern et V. Giovangigli : *Multicomponent Transport Algorithms*, volume 24. Springer Science & Business Media, 1994.

[77] A. Ern et V. Giovangigli : Fast and Accurate Multicomponent Transport Property Evaluation. *Journal of Computational Physics*, 120(1):105–116, 1995.

[78] A. Ern et V. Giovangigli : eglib: a general-purpose fortran library for multicomponent transport property evaluation. Rapport technique, Manual of EGLIB Version, 2004.

[79] D. Fabre, L. Jacquin et J. Sesterhenn : Linear interaction of a cylindrical entropy spot with a shock. *Physics of Fluids*, 13:2403–2422, 2001.

[80] E. A. Fadlun, R. Verzicco, P. Orlandi et J. Mohd-Yusof : Combined immersed-boundary finite-difference methods for three-dimensional complex flow simulations. *Journal of Computational Physics*, 161:35–60, 2000.

[81] R. P. Fedkiw, B. Merriman et S. Osher : *Numerical methods for a mixture of thermally perfect and/or calorically perfect gaseous species with chemical reactions*. Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1996.

[82] R. P. Fedkiw, B. Merriman et S. Osher : High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry. *Journal of Computational Physics*, 132:175–190, 1997.

[83] W. J. Feiereisen, W. C. Reynolds et J. H. Ferziger : Numerical simulation of a compressible homogeneous, turbulent shear flow. Rapport technique No. TF-13, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1981.

[84] J. H. Ferziger et H. G. Kaper : Mathematical Theory of Transport Processes in Gases. *American Journal of Physics*, 41(4):601–603, 1973.

[85] B. Fornberg : Steady viscous flow past a sphere at high Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, 190:471–489, 1988.

[86] G. Fru, G. Janiga et D. Thévenin : Direct numerical simulations of the impact of high turbulence intensities and volume viscosity on premixed methane flames. *Journal of Combustion*, 2011, 2011.

[87] S. Fu et Q. Li : Numerical simulation of compressible mixing layers. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 27:895–901, 2006.

[88] T. Fujimori, M. Murayama, J. Sato, H. Kobayashi et T. Niioka : Flame-holding behind a wedge by incident shock waves. *In Iutam Symposium on Combustion in Supersonic Flows*, pages 95–110, 1997.

[89] B. Ganapathisubramani, K. Lakshminarasimhan et N. T. Clemens : Investigation of three-dimensional structure of fine scales in a turbulent jet by using cinematographic stereoscopic particle image velocimetry. *Journal of Fluid Mechanics*, 598:141–175, 2008.

[90] A. Garcia : *Etude et modélisation de la structure fine des champs scalaires en écoulement turbulent*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 2006.

[91] R. Ghias, R. Mittal et T. Lund : A non-body conformal grid method for simulation of compressible flows with complex immersed boundaries. *In 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 80, 2004.

[92] R. G. Gilbert, K. Luther et J. Troe : Theory of Thermal Unimolecular Reactions in the Fall-off Range. II. Weak Collision Rate Constants. *Berichte der Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie*, 87(2):169–177, 1983.

[93] E. Gledzer : On the Taylor hypothesis corrections for measured energy spectra of turbulence. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 104:163–183, 1997.

[94] R. Gomes-Fernandes, B. Ganapathisubramani et J. C. Vassilicos : Evolution of the velocity-gradient tensor in a spatially developing turbulent flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 756:252–292, 2014.

[95] H. Gonzalez et G. Emanuel : Effect of bulk viscosity on Couette flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 5(5):1267–1268, 1993.

[96] M. Gonzalez et P. Paranthoën : Mélange local et comportement non-stationnaire du gradient d'un scalaire passif. *In 19ième Congrès français de Mécanique*, 2009.

[97] M. Gonzalez et P. Paranthoën : Influence of vorticity alignment upon scalar gradient production in three-dimensional, isotropic turbulence. *In Journal of Physics : Conference Series*, volume 318, page 052041, 2011.

[98] S. Gordon et B. McBride : Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations. Rapport technique, NASA SP-273, 1976.

[99] S. Gottlieb et C. W. Shu : Total variation diminishing Runge-Kutta schemes. *Mathematics of computation of the American Mathematical Society*, 67:73–85, 1998.

[100] F. Grasso et S. Pirozzoli : Shock-wave–vortex interactions: shock and vortex deformations, and sound production. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 13:421–456, 2000.

[101] R. E. Graves et B. M. Argrow : Bulk viscosity: past to present. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 13(3):337–342, 1999.

[102] C. J. Greenshields, H. G. Weller, L. Gasparini et J. M. Reese : Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 63:1–21, 2010.

[103] The HDF Group : Hierarchical Data Format, version 5, 1997-NNNN. http ://www.hdfgroup.org/HDF5/.

[104] N. Grube, E. Taylor et P. Martin : Numerical investigation of shock-wave/isotropic turbulence interaction. *In 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 480, 2011.

[105] M. Guala, B. Lüthi, A. Liberzon, A. Tsinober et W. Kinzelbach : On the evolution of material lines and vorticity in homogeneous turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 533:339–359, 2005.

[106] G. M. Guldberg et P. Waage : Ueber die Chemische Affinität. §1. Einleitung. *Advanced Synthesis & Catalysis*, 19(1):69–114, 1879.

[107] G. Gulitski, M. Kholmyansky, W. Kinzelbach, B. Lüthi, A. Tsinober et S. Yorish : Velocity and temperature derivatives in high-Reynolds-number turbulent flows in the atmospheric surface layer. Part 1. Facilities, methods and some general results. *Journal of Fluid Mechanics*, 589:57–81, 2007.

[108] G. Gulitski, M. Kholmyansky, W. Kinzelbach, B. Lüthi, A. Tsinober et S. Yorish : Velocity and temperature derivatives in high-Reynolds-number turbulent flows in the atmospheric surface layer. Part 2. Accelerations and related matters. *Journal of Fluid Mechanics*, 589:83–102, 2007.

[109] G. Gulitski, M. Kholmyansky, W. Kinzelbach, B. Lüthi, A. Tsinober et S. Yorish : Velocity and temperature derivatives in high-Reynolds-number turbulent flows in the atmospheric surface layer. Part 3. Temperature and joint statistics of temperature and velocity derivatives. *Journal of Fluid Mechanics*, 589:103–123, 2007.

[110] J. F. Haas et B. Sturtevant : Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogeneities. *Journal of Fluid Mechanics*, 181:41–76, 1987.

[111] A. Hadjadj et A. Kudryavtsev : Computation and flow visualization in high-speed aerodynamics. *Journal of Turbulence*, 6:N16, 2005.

[112] F. E. Ham, F. S. Lien et A. B. Strong : A Cartesian grid method with transient anisotropic adaptation. *Journal of Computational Physics*, 179(2):469–494, 2002.

[113] R. Hannappel et R. Friedrich : Direct numerical simulation of a Mach 2 shock interacting with isotropic turbulence. *Applied Scientific Research*, 54:205–221, 1995.

[114] A. Harten, B. Engquist, S. Osher et S. Chakravarthy : Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III. *Journal of Computational Physics*, 71:231–303, 1987.

[115] X. He et L. S. Luo : Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation. *Journal of Statistical Physics*, 88:927–944, 1997.

[116] P. W. Hermans, L. J. F. Hermans et J. J. M. Beenakker : A survey of experimental data related to the non-spherical interaction for the hydrogen isotopes and their mixture with noble gases. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 122(1-2):173–211, 1983.

[117] D. J. Hill et D. I. Pullin : Hybrid tuned center-difference-WENO method for large eddy simulations in the presence of strong shocks. *Journal of Computational Physics*, 194:435–450, 2004.

[118] J. O. Hinze : *Turbulence*. McGraw-Hill, New York, 1959.

[119] K. Horiuti : A classification method for vortex sheet and tube structures in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 13:3756–3774, 2001.

[120] H. Huh et J. F. Driscoll : Shock-wave-enhancement of the mixing and the stability limits of supersonic hydrogen-air jet flames. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 2933–2939, 1996.

[121] G. Iaccarino, G. Kalitzin, P. Moin et B. Khalighi : Local grid refinement for an immersed boundary RANS solver. *In 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, page 586, 2004.

[122] G. Iaccarino et R. Verzicco : Immersed boundary technique for turbulent flow simulations. *Applied Mechanics Reviews*, 56:331–347, 2003.

[123] O. Inoue et Y. Hattori : Sound generation by shock–vortex interactions. *Journal of Fluid Mechanics*, 380:81–116, 1999.

[124] S. A. Isaev et D. A. Lysenko : Testing of the fluent package in calculation of supersonic flow in a step channel. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 77:857–860, 2004.

[125] F. A. Jaberi, D. Livescu et C. K. Madnia : Characteristics of chemically reacting compressible homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, 12:1189–1209, 2000.

[126] S. Jamme, J. B. Cazalbou, F. Torres et P. Chassaing : Direct numerical simulation of the interaction between a shock wave and various types of isotropic turbulence. *Flow, Turbulence and Combustion*, 68:227–268, 2002.

[127] S. Jamme, M. Crespo et P. Chassaing : A study of sheared turbulence/shock interaction: velocity fluctuations and enstrophy behaviour. *In Turbulence and Interactions*, pages 107–114. Springer, 2014.

[128] S. Jamme, F. Torres, J. B. Cazalbou et P. Chassaing : Parallel direct numerical simulation of shock-turbulence interaction. *In Parallel Computational Fluid Dynamics 1998*, pages 163–170. Elsevier, 1999.

[129] J. Jeong et F. Hussain : On the identification of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 285:69–94, 1995.

[130] J. Jeong, F. Hussain, W. Schoppa et J. Kim : Coherent structures near the wall in a turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 332:185–214, 1997.

[131] J. Jiménez : Kinematic alignment effects in turbulent flows. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4:652–654, 1992.

[132] J. Jiménez, A. A. Wray, P. G. Saffman et R. S. Rogallo : The structure of intense vorticity in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 255:65–90, 1993.

[133] T. A. Johnson : *Numerical and experimental investigation of flow past a sphere up to a Reynolds number of 300*. Thèse de doctorat, University of Iowa, 1996.

[134] W. P. Jones et P. Musonge : Closure of the Reynolds stress and scalar flux equations. *The Physics of Fluids*, 31:3589–3604, 1988.

[135] D. Juric : *Computations of phase change*. Thèse de doctorat, The University of Michigan, 1996.

[136] D. Juric et G. Tryggvason : A front-tracking method for dendritic solidification. *Journal of Computational Physics*, 123:127–148, 1996.

[137] J. Kaca : An interferometric investigation of the diffraction of a planar shock wave over a semicircular cylinder. *NASA STI/Recon Technical Report N*, 89, 1988.

[138] H. Kahalerras, Y. Malecot, Y. Gagne et B. Castaing : Intermittency and Reynolds number. *Physics of Fluids*, 10:910–921, 1998.

[139] R. J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M. E. Coltrin et J. A. Miller : A Fortran Computer Code Package for the evaluation of Gas-phase Multicomponent Transport Properties. Rapport technique, Sandia National Laboratories Report SAND86-8246, 1986.

[140] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke et J. A. Miller : A FORTRAN Program for Modeling Steady Laminar One-Dimensional Premixed Flames. Rapport technique, Sandia National Laboratories Report SAND85-8240, 1986.

[141] R. J. Kee, F. M. Rupley, E. Meeks et J. A. Miller : chemkin-III: a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics, 1996.

[142] R. M. Kerr : Higher-order derivative correlations and the alignment of small-scale structures in isotropic numerical turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 153:31–58, 1985.

[143] N. Kevlahan, K. Mahesh et S. Lee : Evolution of the shock front and turbulence structures in the shock/turbulence interaction. *In* D. Spinks, éditeur : *Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases*, 1992.

[144] S. Kida et S. A. Orszag : Energy and spectral dynamics in forced compressible turbulence. *Journal of Scientific Computing*, 5(2):85–125, 1990.

[145] S. Kobayashi et T. Adachi : Experiment on the stability of oblique shock reflection in the dual-solution regime. *In Proceedings of the 21-st International Shock Interation Symposium*, pages 26–29. University of Latvia, 2014. ISBN 978-9934-517-57-0.

[146] V. K. Konyukhov, V. V. Korogod et V. I. Tikhonov : A phase method of measuring the vibrational relaxation time for CO_2 molecules. *Journal of Applied Spectroscopy*, 10(2):174–176, 1969.

[147] L. S. G. Kovasznay : Turbulence in supersonic flow. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 20:657–674, 1953.

[148] G. Kumar, S. S. Girimaji et J. Kerimo : weno-enhanced gas-kinetic scheme for direct simulations of compressible transition and turbulence. *Journal of Computational Physics*, 234:499–523, 2013.

[149] A. Kurganov et G. Petrova : Central-upwind schemes on triangular grids for hyperbolic systems of conservation laws. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 21:536–552, 2005.

[150] M. C. Lai et C. S. Peskin : An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. *Journal of Computational Physics*, 160:705–719, 2000.

[151] L. D. Landau et E. M. Lifschitz : *Statistische Physik*. Akademie-Verlag, 1987.

[152] J. Larsson, I. Bermejo-Moreno et S. K. Lele : Reynolds-and Mach-number effects in canonical shock–turbulence interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 717:293–321, 2013.

[153] J. Larsson et S. K. Lele : Direct numerical simulation of canonical shock/turbulence interaction. *Physics of Fluids*, 21:126101, 2009.

[154] P. D. Lax et X. D. Liu : Solution of two-dimensional Riemann problems of gas dynamics by positive schemes. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19:319–340, 1998.

[155] S. Lee, S. K. Lele et P. Moin : Simulation of spatially evolving turbulence and the applicability of Taylor's hypothesis in compressible flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4:1521–1530, 1992.

[156] S. Lee, S. K. Lele et P. Moin : Direct numerical simulation of isotropic turbulence interacting with a weak shock wave. *Journal of Fluid Mechanics*, 251:533–562, 1993.

[157] S. Lee, S. K. Lele et P. Moin : Interaction of isotropic turbulence with shock waves: effect of shock strength. *Journal of Fluid Mechanics*, 340:225–247, 1997.

[158] H. F. Lehr : Experiments on shock-induced combustion. *Astronautica Acta*, 17:589–597, 1972.

[159] S. K. Lele : Shock-jump relations in a turbulent flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4:2900–2905, 1992.

[160] S. K. Lele : Compressibility effects on turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 26(1):211–254, 1994.

[161] S. K. Lele et J. Larsson : Shock-turbulence interaction: What we know and what we can learn from peta-scale simulations. *In Journal of Physics : Conference Series*, volume 180, 2009.

[162] W. Liao, Y. Peng et L. S. Luo : Gas-kinetic schemes for direct numerical simulations of compressible homogeneous turbulence. *Physical Review E*, 80(4):046702, 2009.

[163] A. L. F. Lima E Silva, A. Silveira-Neto et J. J. R. Damasceno : Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, 189:351–370, 2003.

[164] F. A. Lindemann, S. Arrhenius, I. Langmuir, N. R. Dhar, J. Perrin et W. C. Lewis : Discussion on "The Radiation Theory of Chemical Action". *Transactions of the Faraday Society*, 17:598–606, 1922.

[165] R. Liska et B. Wendroff : Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25:995–1017, 2003.

[166] X. D. Liu, S. Osher et T. Chan : Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, 115:200–212, 1994.

[167] Y. Liu et Y. Mori : Properties of discrete delta functions and local convergence of the immersed boundary method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50:2986–3015, 2012.

[168] G. Lodato, P. Domingo et L. Vervisch : Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 227:5105–5143, 2008.

[169] T. Lu et C. K. Law : Toward Accommodating Realistic Fuel Chemistry in Large-Scale Computations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 35(2):192–215, 2009.

[170] J. L. Lumley : Interpretation of time spectra measured in high-intensity shear flows. *The Physics of Fluids*, 8:1056–1062, 1965.

[171] J. L. Lumley : Computational modeling of turbulent flows. *Advances in Applied Mechanics*, 18:123–176, 1979.

[172] T. S. Lund et M. M. Rogers : An improved measure of strain state probability in turbulent flows. *Physics of Fluids*, 6:1838–1847, 1994.

[173] K. Mahesh, S. Lee, S. K. Lele et P. Moin : The interaction of an isotropic field of acoustic waves with a shock wave. *Journal of Fluid Mechanics*, 300:383–407, 1995.

[174] K. Mahesh, S. K. Lele et P. Moin : The influence of entropy fluctuations on the interaction of turbulence with a shock wave. *Journal of Fluid Mechanics*, 334:353–379, 1997.

[175] K. Mahesh, P. Moin et S. K. Lele : The interaction of a shock wave with a turbulent shear flow. Rapport technique No. TF-69, Thermosciences division, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, 1996.

[176] I. Mahle : *Direct and large-eddy simulation of inert and reacting compressible turbulent shear layers*. Thèse de doctorat, Technische Universität München, 2007.

[177] D. Maier, J. Hesser et R. Männer : Fast and accurate closest point search on triangulated surfaces and its application to head motion estimation. *In 3rd WSEAS International Conference on SIGNAL, SPEECH and IMAGE PROCESSING*, 2003.

[178] T. Mantel et R. Borghi : A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combustion and Flame*, 96:443–457, 1994.

[179] C. N. Markides et E. Mastorakos : Measurements of the statistical distribution of the scalar dissipation rate in turbulent axisymmetric plumes. *Flow, Turbulence and Combustion*, 81:221–234, 2008.

[180] J. Martin, A. Ooi, M. S. Chong et J. Soria : Dynamics of the velocity gradient tensor invariants in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 10:2336–2346, 1998.

[181] J. M. L. Martin, J.-P. François et R. Gijbels : First principles computation of thermochemical properties beyond the harmonic approximation. I. Method and application to the water molecule and its isotopomers. *The Journal of chemical physics*, 96:7633–7645, 1992.

[182] P. J. Martinez-Ferrer : *Simulation numérique directe dans la combustion turbulente sur une couche de cisaillement.* Thèse de doctorat, ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers, 2013.

[183] P. J. Martinez-Ferrer, R. Buttay, G. Lehnasch et A. Mura : A detailed verification procedure for compressible reactive multicomponent Navier–Stokes solvers. *Computers & Fluids*, 89:88–110, 2014.

[184] P. J. Martinez-Ferrer, G. Lehnasch et A. Mura : Compressibility and heat release effects in high-speed reactive mixing layers I.: Growth rates and turbulence characteristics. *Combustion and Flame*, 180:284–303, 2017.

[185] A. D. McNaught et A. D. McNaught : *Compendium of Chemical Terminology*, volume 1669. Blackwell Science Oxford, 1997.

[186] R. Mei et W. Shyy : On the finite difference-based lattice Boltzmann method in curvilinear coordinates. *Journal of Computational Physics*, 143:426–448, 1998.

[187] M. F. Miller, C. T. Bowman et M. G. Mungal : An experimental investigation of the effects of compressibility on a turbulent reacting mixing layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 356:25–64, 1998.

[188] R. R. Mills Jr, A. L. Kistler, V. O'brien et S. Corrsin : Turbulence and temperature fluctuations behind a heated grid. Rapport technique No. 4288, NASA, 1958.

[189] R. E. Mitchell et R. J. Kee : General-purpose computer code for predicting chemical-kinetic behavior behind incident and reflected shocks. Rapport technique, Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1982.

[190] R. Mittal et G. Iaccarino : Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37:239–261, 2005.

[191] J. Mohd-Yusof : Combined immersed-boundary/B-spline methods for simulations of ow in complex geometries. *Annual Research Briefs*, 317, 1997.

[192] F. K. Moore : Unsteady oblique interaction of a shock wave with a plane disturbance. Rapport technique 1165, NACA, 1953.

[193] A. Mura et R. Borghi : Towards an extended scalar dissipation equation for turbulent premixed combustion. *Combustion and flame*, 133:193–196, 2003.

[194] G. R. Newman, B. E. Launder et J. L. Lumley : Modelling the behaviour of homogeneous scalar turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 111:217–232, 1981.

[195] F. Nieuwstadt et H. B. Keller : Viscous flow past circular cylinders. *Computers & Fluids*, 1:59–71, 1973.

[196] K. K. Nomura et S. E. Elghobashi : Mixing characteristics of an inhomogeneous scalar in isotropic and homogeneous sheared turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4:606–625, 1992.

[197] K. K. Nomura et G. K. Post : The structure and dynamics of vorticity and rate of strain in incompressible homogeneous turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 377:65–97, 1998.

[198] M. Ó Conaire, H. J. Curran, J. M. Simmie, W. J. Pitz et C. K. Westbrook : A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics*, 36(11):603–622, 2004.

[199] W. L. Oberkampf et C. J. Roy : *Verification and validation in scientific computing*. Cambridge University Press, 2010.

[200] A. Ooi, J. Martin, J. Soria et M. S. Chong : A study of the evolution and characteristics of the invariants of the velocity-gradient tensor in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 381:141–174, 1999.

[201] S. A. Orszag et G. S. Patterson Jr : Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters*, 28:76, 1972.

[202] P. L. O'neill, D. Nicolaides, D. Honnery et J. Soria : Autocorrelation functions and the determination of integral length with reference to experimental and numerical data. *In 15th Australasian Fluid Mechanics Conference*, volume 1, pages 1–4. The University of Sydney, 2004.

[203] C. Pantano et S. Sarkar : A study of compressibility effects in the high-speed turbulent shear layer using direct simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 451:329–371, 2002.

[204] T. Passot et A. Pouquet : Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181:441–466, 1987.

[205] A. E. Perry et M. S. Chong : Topology of flow patterns in vortex motions and turbulence. *Applied Scientific Research*, 53:357–374, 1994.

[206] C. S. Peskin : Flow patterns around heart valves: a numerical method. *Journal of Computational Physics*, 10:252–271, 1972.

[207] C. S. Peskin : The fluid dynamics of heart valves: experimental, theoretical, and computational methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 14:235–259, 1982.

[208] C. S. Peskin : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11:479–517, 2002.

[209] C. S. Peskin et B. F. Printz : Improved volume conservation in the computation of flows with immersed elastic boundaries. *Journal of Computational Physics*, 105:33–46, 1993.

[210] N. Peters, J. Boschung, M. Gauding, J. H. Goebbert, R. J. Hill et H. Pitsch : Higher-order dissipation in the theory of homogeneous isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 803:250–274, 2016.

[211] J. M. Picone et J. P. Boris : Vorticity generation by shock propagation through bubbles in a gas. *Journal of Fluid Mechanics*, 189:23–51, 1988.

[212] C. D. Pierce : *Progress-variable approach for large-eddy simulation of turbulent combustion*. Thèse de doctorat, stanford university California, USA, 2001.

[213] S. Pirozzoli : Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction. *Journal of Computational Physics*, 178:81–117, 2002.

[214] S. Pirozzoli et F. Grasso : Direct numerical simulations of isotropic compressible turbulence: Influence of compressibility on dynamics and structures. *Physics of Fluids*, 16(12):4386–4407, 2004.

[215] T. Poinsot et S. K. Lele : Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101:104–129, 1992.

[216] T. Poinsot et D. Veynante : *Theoretical and Numerical Combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.

[217] G. J. Prangsma, A. H. Alberga et J. J. M. Beenakker : Ultrasonic determination of the volume viscosity of N_2, CO, CH_4 and CD_4 between 77 and 300 K. *Physica*, 64(2):278–288, 1973.

[218] G. J. Prangsma, L. J. M. Borsboom, H. F. P. Knaap, C. J. N. Van den Meijdenberg et J. J. M. Beenakker : Rotational relaxation in ortho hydrogen between 170 and 300 K. *Physica*, 61(4):527–538, 1972.

[219] A. Pumir : A numerical study of the mixing of a passive scalar in three dimensions in the presence of a mean gradient. *Physics of Fluids*, 6:2118–2132, 1994.

[220] J. J. Quirk : AMRITA: A computational facility (for CFD modelling). *Lecture Series Van-Kareman Institute for Fluid Dynamics*, 3:D1–D72, 1998.

[221] B. N. Rajani, A. Kandasamy et S. Majumdar : Numerical simulation of laminar flow past a circular cylinder. *Applied Mathematical Modelling*, 33:1228–1247, 2009.

[222] S. Rathan et G. N. Raju : An Improved Non-linear Weights for Seventh-Order WENO Scheme. *arXiv preprint arXiv :1611.06755*, 2016.

[223] A. Rault, G. Chiavassa et R. Donat : Shock-vortex interactions at high Mach numbers. *Journal of Scientific Computing*, 19:347–371, 2003.

[224] J. Reveillon : *Simulation dynamique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées*. Thèse de doctorat, Université de Rouen, 1996.

[225] H. S. Ribner : Convection of a pattern of vorticity through a shock wave. Rapport technique No. 1164, NACA, 1954.

[226] J. R. Ristorcelli et G. A. Blaisdell : Consistent initial conditions for the DNS of compressible turbulence. *Physics of Fluids*, 9:4–6, 1997.

[227] R. S. Rogallo : Numerical experiments in homogeneous turbulence. Rapport technique No. 81315, NASA, 1981.

[228] D. Rotman : Shock wave effects on a turbulent flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 3:1792–1806, 1991.

[229] D. H. Rudy et J. C. Strikwerda : A nonreflecting outflow boundary condition for subsonic Navier-Stokes calculations. *Journal of Computational Physics*, 36:55–70, 1980.

[230] G. R. Ruetsch et M. R. Maxey : The evolution of small-scale structures in homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 4:2747–2760, 1992.

[231] J. Ryu et D. Livescu : Turbulence structure behind the shock in canonical shock–vortical turbulence interaction. *Journal of Fluid Mechanics*, 756, 2014.

[232] P. Sagaut et C. Cambon : *Homogeneous turbulence dynamics*, volume 10. Citeseer, 2008.

[233] E. M. Saiki et S. Biringen : Numerical simulation of a cylinder in uniform flow: application of a virtual boundary method. *Journal of Computational Physics*, 123:450–465, 1996.

[234] S. K. Sambasivan et H. S. UdayKumar : Ghost Fluid method for strong shock interactions Part 2: Immersed solid boundaries. *AIAA Journal*, 47:2923–2937, 2009.

[235] R. Samtaney, D. I. Pullin et B. Kosović : Direct numerical simulation of decaying compressible turbulence and shocklet statistics. *Physics of Fluids*, 13:1415–1430, 2001.

[236] S. Sarkar, G. Erlebacher, M. Y. Hussaini et H. O. Kreiss : The analysis and modelling of dilatational terms in compressible turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 227:473–493, 1991.

[237] H. Schardin : High frequency cinematography in the shock tube. *The Journal of Photographic Science*, 5:17–19, 1957.

[238] B Sekar et HS Mukunda : A computational study of direct simulation of high speed mixing layers without and with chemical heat release. *In Symposium (International) on Combustion*, volume 23, pages 707–713. Elsevier, 1991.

[239] Y. Shen et G. Zha : Improved seventh-order WENO scheme. *In 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, page 1451, 2010.

[240] J. Shi, Y. T. Zhang et C. W. Shu : Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures. *Journal of Computational Physics*, 186:690–696, 2003.

[241] C. W. Shu : Essentially Non-Oscillatory and Weighted Essentially Non-oscillatory Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. *In Advanced numerical approximation of nonlinear hyperbolic equations*, pages 325–432. Springer, 1998.

[242] K. Sinha, K. Mahesh et G. V. Candler : Modeling shock unsteadiness in shock/turbulence interaction. *Physics of Fluids*, 15:2290–2297, 2003.

[243] G. A. Sod : A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 27:1–31, 1978.

[244] J. Soria, R. Sondergaard, B. J. Cantwell, M. S. Chong et A. E. Perry : A study of the fine-scale motions of incompressible time-developing mixing layers. *Physics of Fluids*, 6:871–884, 1994.

[245] F. Sotiropoulos et X. Yang : Immersed boundary methods for simulating fluid–structure interaction. *Progress in Aerospace Sciences*, 65:1–21, 2014.

[246] E. H. Spanier : *Algebraic topology*. Springer Science & Business Media, 1989.

[247] S. Stanley et S. Sarkar : Simulations of spatially developing two-dimensional shear layers and jets. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 9(2):121–147, 1997.

[248] P. H. Stewart, C. W. Larson et D. M. Golden : Pressure and Temperature Dependence of Reactions Proceeding via a Bound Complex. 2. Application to $2CH_3 \rightarrow C_2H_5 + H$. *Combustion and Flame*, 75(1):25–31, 1989.

[249] G. G. Stokes : *On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*, volume 9. Pitt Press Cambridge, 1851.

[250] J. C. Strikwerda : *Finite difference schemes and partial differential equations*. SIAM, 2004.

[251] D. R. Stull et H. Prophet : janaf thermochemical tables. Rapport technique, DTIC Document, 1971.

[252] S. Tavoularis, J. C. Bennett et S. Corrsin : Velocity-derivative skewness in small Reynolds number, nearly isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 88:63–69, 1978.

[253] A. Techer : *Simulation aux Grandes Échelles Explicite et Implicite de la Combustion Supersonique.* Thèse de doctorat, Chasseneuil-du-Poitou, Ecole nationale supérieure de mécanique et d'aérotechnique, 2017.

[254] K. W. Thompson : Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 68:1–24, 1987.

[255] P. A. Thompson : *Compressible-Fluid Mechanics*. Advanced engineering series. Maple Press Co, 1984.

[256] L. Tisza : Supersonic absorption and Stokes' viscosity relation. *Physical Review*, 61(7-8):531, 1942.

[257] A. A. Townsend : *The structure of turbulent shear flow*. Cambridge university press, 1980.

[258] Y. H. Tseng et J. H. Ferziger : A ghost-cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *Journal of Computational Physics*, 192:593–623, 2003.

[259] A. Tsinober : *An informal conceptual introduction to turbulence: of an informal introduction to turbulence*, volume 92. Springer Science & Business Media, 2009.

[260] A. Tsinober et B. Galanti : Exploratory numerical experiments on the differences between genuine and "passive" turbulence. *Physics of Fluids*, 15:3514–3531, 2003.

[261] A. Tsinober, E. Kit et T. Dracos : Experimental investigation of the field of velocity gradients in turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 242:169–192, 1992.

[262] Arkady Tsinober : Vortex stretching versus production of strain/dissipation. *In* J.C.R. Hunt et J.C. Vassilicos, éditeurs : *Turbulence Structure and Vortex Dynamics*, pages 164–191. Cambridge University Press Cambridge, 2000.

[263] S. O. Unverdi et G. Tryggvason : A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37, 1992.

[264] J. Urzay : Supersonic Combustion in Air-Breathing Propulsion Systems for Hypersonic Flight. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50(1), 2018.

[265] P. Vedula, P. K. Yeung et R. O. Fox : Dynamics of scalar dissipation in isotropic turbulence: a numerical and modelling study. *Journal of Fluid Mechanics*, 433:29–60, 2001.

[266] V. K. Veera et K. Sinha : Modeling the effect of upstream temperature fluctuations on shock/homogeneous turbulence interaction. *Physics of Fluids*, 21:025101, 2009.

[267] J. B. Vemula et K. Sinha : Reynolds stress models applied to canonical shock-turbulence interaction. *Journal of Turbulence*, 18:653–687, 2017.

[268] H. K. Versteeg et W. Malalasekera : *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. Pearson Education, 2007.

[269] R. Vicquelin : *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente*. Thèse de doctorat, Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris, 2010.

[270] A. Vincent et M. Meneguzzi : The dynamics of vorticity tubes in homogeneous turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 258:245–254, 1994.

[271] W. G. Vincenti et C. H. Kruger : *Introduction to physical gas dynamics*. Wiley, 1965.

[272] J. Wang, Y. Shi, L. P. Wang, Z. Xiao, X. He et S. Chen : Effect of compressibility on the small-scale structures in isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 713:588–631, 2012.

[273] L. Wang et N. Peters : The length-scale distribution function of the distance between extremal points in passive scalar turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 554:457–475, 2006.

[274] Z. Warhaft : Passive scalars in turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 32:203–240, 2000.

[275] J. Warnatz, U. Mass et R. W. Dibble : *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modelling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[276] F. A. Williams : Turbulent Combustion. *The mathematics of Combustion*, 2:267–294, 1985.

[277] P. Woodward et P. Colella : The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of Computational Physics*, 54:115–173, 1984.

[278] S. Woop, C. Benthin et I. Wald : Watertight ray/triangle intersection. *Journal of Computer Graphics Techniques (JCGT)*, 2:65–82, 2013.

[279] J. G. Wouchuk, C. H. R. de Lira et A. L. Velikovich : Analytical linear theory for the interaction of a planar shock wave with an isotropic turbulent vorticity field. *Physical Review E*, 79:066315, 2009.

[280] X. Wu : Inflow turbulence generation methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 49:23–49, 2017.

[281] Z. Xiong, S. Nagarajan et S. K. Lele : Simple method for generating inflow turbulence. *AIAA Journal*, 42:2164–2166, 2004.

[282] T. Ye, R. Mittal, H. S. Udaykumar et W. Shyy : An accurate Cartesian grid method for viscous incompressible flows with complex immersed boundaries. *Journal of Computational Physics*, 156:209–240, 1999.

[283] C. S. Yoo, Y. Wang, A. Trouvé et H. G. Im : Characteristic boundary conditions for direct simulations of turbulent counterflow flames. *Combustion Theory and Modelling*, 9:617–646, 2005.

[284] H. Z. Yuan, X. D. Niu, S. Shu, M. Li et H. Yamaguchi : A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating a flexible filament in an incompressible flow. *Computers & Mathematics with Applications*, 67:1039–1056, 2014.

[285] S. H. Zhang, X. G. Deng, M. L. Mao et C. W. Shu : Improvement of convergence to steady state solutions of Euler equations with weighted compact nonlinear schemes. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series*, 29:449–464, 2013.

[286] T. Zhou et R. A. Antonia : Approximations for turbulent energy and temperature variance dissipation rates in grid turbulence. *Physics of Fluids*, 12:335–344, 2000.

[287] L. Zhu, G. He, L. Wang, S. and Miller, X. Zhang, Q. You et S. Fang : An immersed boundary method based on the lattice Boltzmann approach in three dimensions, with application. *Computers & Mathematics with Applications*, 61:3506–3518, 2011.

[288] J. L. Ziegler, R. Deiterding, J. E. Shepherd et D. I. Pullin : An adaptive high-order hybrid scheme for compressive, viscous flows with detailed chemistry. *Journal of Computational Physics*, 230:7598–7630, 2011.

[289] J. Zółtak et D. Drikakis : Hybrid upwind methods for the simulation of unsteady shock-wave diffraction over a cylinder. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 162:165–185, 1998.

Résumé

L'étude des écoulements compressibles, notamment supersoniques, traversant les chambres de combustion de certains moteurs *ramjet* et *scramjet*, requiert la prise en compte de différents dispositifs complexes pour l'amélioration du processus de combustion et en particulier de leur stabilisation. La connaissance des interactions entre la turbulence, les effets de compressibilité, et les interaction fluide-solide dans ce type d'écoulement reste imparfaite. Ce travail de thèse est dédié à l'amélioration de notre compréhension de ce type d'écoulement dans un certain nombre de configurations canoniques par la biais de la simulation numérique directe. L'ensemble des simulations conduites s'appuie sur l'emploi d'un outil de simulation numérique *haute fidélité* : `CREAMS` *(Compressible REActive Multi-species Solver)* développé à l'Institut Pprime. Ce code de calcul met en œuvre des schémas numériques d'ordre élevé : schéma Runge–Kutta d'ordre 3 pour l'intégration temporelle combiné à un schéma `WENO` d'ordre 7 et centré d'ordre 8 pour la discrétisation spatiale. Dans un premier temps, nous présentons une nouvelle méthode de frontières immergées pour le calcul d'écoulement d'un fluide visqueux compressible dans des géométries irrégulières. La méthode développée dans le cadre de cette thèse est basée sur la combinaison de l'approche appelée "Direct forcing" et celle de "Ghost-Point-Forcing". L'originalité de cette méthode réside dans sa capacité à simuler des écoulements subsoniques et supersoniques à différents nombres de Reynolds. L'examen de précision de cette méthode a permis d'établir un ordre supérieur à deux et sa robustesse est éprouvée par l'étude d'un bon nombre de cas tests. Dans un second temps, une configuration canonique idéalisée d'interaction choc-turbulence est étudiée pour mettre en lumière les mécanismes physiques fondamentaux caractéristiques du phénomène d'interaction entre une turbulence homogène isotrope et une onde de choc droite. Cette étude est complétée par une étude d'interaction choc-mélange scalaire pour étudier l'impact du choc normal sur le processus du mélange. Ce travail permet de mettre en place une base de données de résultats susceptibles d'être confrontés ultérieurement à des calculs basés sur l'emploi de modèles de turbulence. Enfin, nous nous sommes intéressés à l'effet des propriétés de transport moléculaire, en particulier celles de la viscosité volumique, sur le développement d'une couche de mélange impactée par un choc oblique. Les simulations réalisées dans cette configuration ont permis d'étudier la validité de l'hypothèse de Stokes consistant à négliger l'effet de la viscosité volumique.

Mots clés : Statoréacteurs à combustion supersonique / Simulation numérique / Compressibilité / Turbulence / Mélange / Choc / Frontières immergées / Viscosité volumique

Résumé

The study of compressible flows, especially supersonic, passing through the combustion chambers of *ramjet* and *scramjet* engines, requires the consideration of various complex devices for improving the combustion process and in particular its stabilization. Indeed, the knowledge of the interactions between turbulence, compressibility effects, and fluid-solid interactions in this type of flow still remains imperfect. This thesis is dedicated to improving our understanding of this type of flow in a number of canonical flow configurations through direct numerical simulation. All the simulations that have been conducted are based on the use of a high-precision numerical simulations tool, called `CREAMS` *(Compressible REActive Multi-species Solver)*, developed at the Pprime Institute. This computational solver makes use of high precision numerical schemes: a 3rd order Runge–Kutta scheme for time integration combined with a 7th order `WENO` and 8th order centered scheme for spatial discretization. In a first step of this study, we present a new immersed boundary method for calculating the flow of compressible viscous fluids in irregular geometries. The method developed in this thesis is based on the combination of the "Direct forcing" approach with the "Ghost-Point-Forcing" strategy. The originality of this method lies in its ability to simulate subsonic and supersonic flows at different Reynolds numbers. The accuracy of this method is found to be slightly larger than second order and its robustness is investigated by considering a large set of benchmarks. In a second step, an idealized canonical configuration of shock-turbulence interaction is studied to highlight the fundamental physical mechanisms that are characteristic of the interaction between an isotropic homogeneous turbulence and a normal shock wave. This analysis is complemented by a scalar shock-mixing interaction study to investigate the impact of normal shock on the mixing process properties. Through this work, a database is made available. It can be used to assess and improve turbulence models. Finally, we investigated the effect of molecular transport properties, more specifically the volume viscosity, on the development of a mixture layer impacted by an oblique shock. The simulations performed in this configuration allow to scrutinize the validity of the Stokes hypothesis that is based on the neglection of the volume viscosity.

Keywords: Supersonic combustion ramjet / Computer simulation / Compressibility / Turbulence / Mixing / Shock wave / Immersed boundary / Volume viscosity