HAL open science

Contribution à l'étude numérique des écoulements turbulents inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique

Bernardo Martinez-Ramirez

To cite this version:

Bernardo Martinez-Ramirez. Contribution à l'étude numérique des écoulements turbulents inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique. Sciences de la Terre. Université de Poitiers, 2005. Français. NNT : . tel-00012093

HAL Id: tel-00012093

https://theses.hal.science/tel-00012093

Submitted on 7 Apr 2006

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'Université de POITIERS

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE de MÉCANIQUE et d'AÉROTECHNIQUE

et

FACULTÉ des SCIENCES FONDAMENTALES et APPLIQUÉES

(Diplôme National - Arrêté du 25 Avril 2002)

École Doctorale : Sciences Pour l'Ingénieur

Secteur de Recherche : Énergie, Thermique, Combustion

Présentée par :

Bernardo MARTÍNEZ RAMÍREZ

****

Contribution à l'étude numérique des écoulements turbulents inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique

****

Directeur de thèse : **M. Pascal BRUEL**

Soutenue le 22 Décembre 2005 devant la commission d'Examen

- Jury -

M. Pascal BRUEL	Chargé de Recherche CNRS, LMA Pau.
M. Marc BUFFAT	Professeur, Université de Lyon 1 (Rapporteur).
M. Gérard LAVERGNE	Professeur, SUPAERO Toulouse (Rapporteur).
M. Jean-Michel MOST	Directeur de Recherche CNRS, LCD Poitiers (Président).
M. Olivier PENANHOAT	Ingénieur de recherche, Attaché Pollution & Programmes R & T Européens, SNECMA Villaroche.
M. Hui Ying WANG	Chargé de Recherche CNRS, LCD Poitiers.

A mon Ange,
Valérie.
A mes petits anges,
Axel et Eva.

A mi madre,
Esther Ramírez V.
A toda mi familia.

A la memoria del
Dr. Salvador Reynoso B.[†]
H U I X I L I H U I

Quien me inicio en el estudio de la Combustion y quien más que un profesor fue un gran amigo y un gran ser humano.

Qui m'a initié à l'étude de la Combustion et qui, plus qu'un professeur, fût un grand ami et un grand être humain.

...

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au Laboratoire de Combustion et de Détonique (UPR 9028 du CNRS), sur les sites du Centre d'Études Aérodynamiques et Thermiques de l'Université de Poitiers et à l'École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique.

Je remercie vivement :

Le CONACyT (Consejo Nacional para la Ciencia y la Técnologia) du gouvernement Mexicain et le LCD pour leur soutien financier.

Michel CHAMPION, directeur de recherche au CNRS, pour m'avoir accueilli dans ce laboratoire dont il eu la direction en charge, Henri-Nöel PRESLES, directeur de recherche au CNRS et directeur du LCD, pour m'avoir permis d'achever la rédaction finale du manuscrit au sein du laboratoire, Pascal BRUEL chargé de recherche au CNRS, qui a dirigé ce travail, pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe Combustion et Turbulence et pour son aide lors de la rédaction de ce manuscrit.

Les membres du jury : Marc BUFFAT, Professeur, Université de Lyon 1, Gérard LAVERGNE, Professeur, SUPAERO Toulouse, Jean-Michel MOST, directeur de recherche au CNRS, LCD Poitiers, Olivier PENANHOAT, Ingénieur de recherche, SNECMA Villaroche et Hui Ying WANG, chargé de recherche au CNRS, LCD Poitiers, qui ont accepté de juger ce mémoire.

Et tout particulièrement Valérie mon épouse, pour son aide à la rédaction de ce manuscrit et mon ami et collègue Guillaume LEHNASCH, pour son aide et ses critiques constructives lors de la rédaction de ce manuscrit, pour les discussions et échanges scientifiques (ce qui nous a permis de mieux comprendre N3Snatur) et pour les bons moments en dehors du laboratoire.

J'exprime toute ma sympathie à l'ensemble du personnel du LCD et à tous ceux qui m'ont soutenu dans ce travail : J.L. CHAMPION, J.-J. DENIS, D. FALAISE, J. VERGER, J. BARDEAU, M. DUPUY, A. MURA et C. LOSIER.

Et à tous les des doctorants et stagiaires du LCD CEAT et de l'ENSMA qui ont partagé de riches expériences avec moi et qui m'ont montré leur amitié et leur soutien : Elena pour sa confiance et son aide et également Antony et Gabriel pour leur aide sans oublier mes premiers jours au CEAT avec Valery, Cathy, Magaly, Stephane, Wladymir, Danh, Khan, Aurely et Thierry et puis la nouvelle génération de l'ENSMA avec Camille, Vincent, Olivier, Rui, Fabien, Marie et Andres.

Et enfin, toute la troupe d'amis de Poitiers, pour leur soutien, leur amitié, leurs encouragements et les bons moments lors de soirées Poitevines.

...

Table des matières

Nomenclature **4**

1 Introduction générale **9**

1.1 Contexte industriel et scientifique 9

1.2 Objectifs de cette étude 11

I Les outils employés **13**

2 Principales caractéristiques des écoulements inertes et réactifs étudiés **14**

2.1 Description de la configuration d'écoulements 14

2.2 Propriétés principales des écoulements obtenus sur ORACLES 16

2.2.1 Structure moyenne 16

2.3 Écoulements retenus pour nos simulations numériques 24

2.4 Les données expérimentales ORACLES au sein de la base de données MOLECULES 25

3 Les modèles physiques employés **28**

3.1 Pour la turbulence 28

3.1.1 Introduction 28

3.1.2 Les équations instantanées 29

3.1.3 Principes de l'approche statistique 31

3.1.4 Les équations moyennes 32

3.1.5 Loi de paroi 39

3.1.6 Modèle à bas nombre de Reynolds : Modèle de Chien 41

3.2 Pour la combustion 43

3.2.1 Taux de réaction chimique moyen 43

3.2.2 Les régimes de combustion 43

3.2.3 Le modèle CLE 45

3.2.4 Quelques éléments relatifs aux propriétés de propagation de base connues *a priori* pour les zones de réaction moyennes à richesse constante associées au modèle retenu . . . 51
3.3 Conclusion . . . 57

4 Programmes de calcul et méthodes numériques associées 58
4.1 Programme N3Snatur : Méthode volumes finis/éléments finis avec préconditionnement pour les bas nombres de Mach, pour les calculs en géométrie bidimensionnelle 58
4.1.1 Introduction . . . 58
4.1.2 Maillage volumes finis/éléments finis en géométrie bidimensionnelle . . . 59
4.1.3 Principes de la méthode mixte . . . 60
4.1.4 Évaluation des flux convectifs . . . 63
4.1.5 Évaluation des flux diffusifs et des termes sources . . . 75
4.1.6 Discrétisation temporelle et implicitation . . . 76
4.1.7 Conditions aux limites . . . 77
4.1.8 La convergence et le résidu . . . 81
4.2 Programme JASON2D : Méthode des différences finies avec une approche de type compressibilité artificielle . . . 82

II Étude numérique : simulation des écoulements inertes et réactifs stabilisés par un élargissement brusque symétrique 87

5 Choix de maillages adaptés et génération des conditions aux limites d'entrée 88
5.1 Positionnement des frontières du domaine de calcul par rapport aux parois solides 88
5.2 Générations de profils d'entrée pour les calculs sur ORACLES avec N3SNatur . . 95
5.3 Estimateur d'écart simulation vs expérience . . . 98

6 Écoulements inertes 100
6.1 Procédures d'initialisation et paramètres de calcul . . . 100
6.2 Propriétés des champs moyens - confrontation qualitative simulations-expérimentation 101
6.2.1 Caractéristiques d'ensemble . . . 102
6.2.2 Étude des caractéristiques de similitude du sillage et des couches de cisaillement . . . 120
6.3 Écart quantitatif entre résultats de simulation et résultats expérimentaux . . . 127

7 Écoulements réactifs 129
7.1 Procédures d'initialisation et d'allumage . . . 129
7.2 Influence d'une augmentation de débit à richesse constante : écoulements à richesse constante c_1, h_1 et m_1 . . . 132

7.2.1 Propriétés d'ensemble des champs moyens 132
7.2.2 Confrontation qualitative simulations-expérimentation 140
7.2.3 Étude des caractéristiques de similitude du sillage et des couches de cisaillement 153
7.3 Influence de la présence d'une différence de richesse incidente : écoulements c_2 et c_3 157
7.3.1 Propriétés d'ensemble des champs moyens 157
7.3.2 Confrontation qualitative simulations-expérimentation 165
7.4 Écart quantitatif entre résultats de simulation et résultats expérimentaux 165

8 Conclusion et perspectives **173**

Bibliographie **174**

III Annexes **181**

A Équations instantanées de l'aérothermochimie **182**

B Le schéma global à une seule réaction chimique la combustion des mélanges air+propane **189**

C Interpolation et fonctions linéaires des éléments finis triangulaires **193**

Nomenclature

Lettres latines	
Minuscules	**Signification**
$a = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$	Vitesse du son ($m\ s^{-1}$).
c	Variable d'avancement de la combustion.
e	Énergie interne massique ($J\ kg^{-1}$).
h	Enthalpie massique ($J\ kg^{-1}$).
h_t	Enthalpie massique totale ($J\ kg^{-1}$).
k	Énergie cinétique de la turbulence ($m^2 s^{-2}$).
k_p ou k_ω	Énergie cinétique de la turbulence en proche paroi ($m^2 s^{-2}$).
k_δ	Énergie cinétique de la turbulence en un point situé à une distance δ de la paroi ($m^2 s^{-2}$).
k_F	Valeur de k au point F où l'égalité $k_F = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}$ est obtenue ($m^2 s^{-2}$).
l_t	Échelle spatiale de turbulence (m).
l_m	Longueur de mélange (m).
$\overrightarrow{n}$	Vecteur unitaire normal à une surface donnée.
p	Pression statique(Pa).
t	Temps (s).
$\overrightarrow{t}$	Vecteur unitaire tangent à une surface donnée.
u_τ ou u_f	Vitesse de frottement ($m\ s^{-1}$).
$u_{//}$	Composante tangentielle à la paroi du vecteur vitesse ($m\ s^{-1}$).
x, y, z	Coordonnées spatiales (m).
Majuscules	**Signification**
C_p	Capacité calorifique massique à pression constante ($J\ kg^{-1} K^{-1}$).
C_v	Capacité calorifique massique à volume constant ($J\ kg^{-1} K^{-1}$).
C_{CLE}	Constante du modèle de combustion CLE.
D_α	Coefficient de diffusion (binaire) de l'espèce α ($m^2 s^{-1}$).
D_t	Coefficient de diffusion turbulente ($m^2 s^{-1}$).

Lettres latines (suite)	
Majuscules	**Signification**
Da	Nombre de Damköhler.
$\mathcal{E}$	Énergie totale massique ($J\ kg^{-1}$).
Ka	Nombre de Karlovitz.
$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\lambda}{\rho C_p D}$	Nombre de Lewis.
M ou Ma	Nombre de Mach.
$\mathcal{M}$	Masse molaire ($kg\ mole^{-1}$).
$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}$	Nombre de Prandtl .
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent.
$R = 8,3145$	Constante universelle des gaz parfaits ($J\ mole^{-1} K^{-1}$).
Re	Nombre de Reynolds.
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent.
$Re_\Lambda = \frac{\Lambda u'_\Lambda}{\nu}$	Nombre de Reynolds turbulent basée sur l'échelle intégrale.
$Re_\eta = \frac{\eta u'_\eta}{\nu}$	Nombre de Reynolds turbulent basée sur l'échelle de Kolmogorov.
$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$	Nombre de Schmidt.
S_l	Vitesse de propagation d'une flamme plane laminaire de prémélange non étirée ($m\ s^{-1}$).
S_t	Vitesse de propagation d'une flamme.plane turbulente de prémélange ($m\ s^{-1}$).
S_{KPP}	Vitesse de propagation d'une flamme plane turbulente de prémélange selon la théorie KPP ($m\ s^{-1}$).
T	Température (K).
T_f	Température de frottement (K).
T_p	Température de la paroi (K).
T_f^0	Température correspondant au mélange air-fuel à richesse $\Phi^0 (K)$.
$T_{b_{eq}}^0$	Température correspondant au sein des gaz brûlés à l'équilibre résultant de la combustion d'un mélange air-fuel à richesse Φ^0 (K).
U_b	Vitesse débitante ($m\ s^{-1}$).
U_d	Vitesse déficitaire (Sillage plan) ($m\ s^{-1}$).
U_{min}	Vitesse moyenne sur l'axe (Sillage plan) ($m\ s^{-1}$).
U_∞	Vitesse écoulement libre (Sillage plan) ($m\ s^{-1}$).
Y	Fraction massique.
Z	Variable de Schvab-Zeldovich (scalaire passif).

Lettres grecques	
Minuscules	**Signification**
δ	Distance à la paroi (m).
δ_{paroi}	Distance entre la paroi et la première maille du domaine de calcul (m).
δ_{amont} et δ_{aval}	Distances entre la paroi et la première maille du domaine de calcul (m) en amont et en aval de l'élargissement brusque du banc d'essai ORACLES (m).
$\delta_{1/2}$	Épaisseur en déficit de vitesse moitié (sillage) (m).
δ^*	Épaisseur de déplacement (m).
δ_ω	Épaisseur de vorticité (couche de cisaillement) (m).
δ'_ω	Dérivée spatiale de l'épaisseur de vorticité.
δ_l	Épaisseur d'une flamme plane laminaire de prémélange non étirée (m).
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique de la turbulence $(m^2 s^{-3})$.
η	Échelle de Kolmogorov (m) ou variable de similitude pour la couche de cisaillement.
κ	Constante de Karman.
λ	Coefficient de conductivité thermique $(kg\ m\ s^{-3} K^{-1})$.
μ	Coefficient de viscosité dynamique de l'écoulement $(kg\ m^{-1} s^{-1})$.
μ_t	Coefficient de viscosité turbulente $(kg\ m^{-1} s^{-1})$.
ν	Viscosité cinématique $(m^2 s^{-1})$ ou itération.
ξ	Variable de similitude (sillage plan).
ρ	Masse volumique $(kg\ m^{-3})$.
τ_{ij}	Composantes du tenseur des déformations ou contraintes visqueuses $(kg\ m^{-1} s^{-2})$.
τ_ω ou τ_p	Contrainte de cisaillement à la paroi $(kg\ m^{-1} s^{-2})$.
$\tau_\Lambda = \frac{\Lambda}{u'_\Lambda}$ et $\tau_\eta = \frac{\eta}{u'_\eta}$	Temps caractéristiques de la turbulence (s).
$\tau_f = \frac{\delta_l}{S_l}$	Temps de transit à travers la flamme de prémélange (s).
χ	Facteur d'expansion thermique.
ω	Terme de production $(kg\ m^{-3} s^{-1})$.
Θ	Épaisseur de quantité de mouvement (m).
Λ	Échelle intégrale de la turbulence (m) ou vitesse de propagation réduite dans l'analyse KPP.
Φ	Richesse.

Notations de moyenne	Signification
$< \Phi >$	Moyenne d'ensemble.
$\overline{\Phi}$	Moyenne de Reynolds.
$\tilde{\Phi}$	Moyenne de Favre.
Φ'	Fluctuation autour de la moyenne de Reynolds.
Φ''	Fluctuation autour de la moyenne de Favre.

Indices	Signification
α	Relatif à une espèce chimique.
c	Combustible.
d	Diluant.
eq	Équilibre chimique.
exp	Expérimental.
f	Fuel.
num	Numérique.
ox	Relatif à l'oxydant.
0	Relatif à un état de référence.
ref	Référence.
p	Produits de combustion.
s	Solénoidal.
st	Stœchiométrique.
v	Virtuel.

Exposants	Signification
ac	Relatif à la méthode de compressibilité artificielle.
n ou ν	Relatif à un instant ou une itération.
0	Relatif à un état de référence.

Acronymes	Signification
CFL	Courant Friedrich Levy.
CLE	Combustion Limitée par l'Équilibre.
CCS	Couche de Cisaillement Supérieure.
CCI	Couche de Cisaillement Inférieure.
KPP	Kolmogorov Petrovskii Piskounov
LCD	Laboratoire de Combustion et de Détonique.
LDV	Laser Doppler Velocimetry.
LPP	Lean Premixed Prevaporised.
$MOLECULES$	Modelling Low Emission Combustors Using Large Eddy Simulations.
$MUSCL$	Monotonic Upstream Conservation Laws.
$ONERA$	Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales.
$ORACLES$	One Rig for Accurate Comparisons with Large Eddy Simulations.
PDF	Probability Density Function.
$PLIF$	Planar Laser Induced Fluorescence.
PPP	Pauvre-Prévaporisé-Prémélangé.
$QUAD$	Module du mailleur ICEMCFD.
$RANS$	Reynolds Averaged Navier Stokes.
rms	Root mean square.
SND *ou* DNS	Simulation Numérique Directe ou Direct Numerical Simulation.
SGE *ou* LES	Simulation aux Grandes Échelles ou Large Eddy Simulation.
TVD	Total Variation Diminishing.
$URANS$	Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes.
ZDR	Zone De Recirculation.

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Contexte industriel et scientifique

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études développées depuis de nombreuses années au Laboratoire de Combustion et de Détonique de Poitiers (LCD) dans le domaine de la modélisation et de l'étude expérimentale et numérique des écoulements turbulents réactifs plus spécifiquement liés au développement des turboréacteurs de nouvelle génération.

MEASURED DATA

MODE	POWER SETTING ($\%F_{oo}$)	TIME minutes	FUEL FLOW kg/s	EMISSIONS INDICES (g/kg) HC	CO	NOx	SMOKE NUMBER
TAKE-OFF	100	0.7	1.056	0.036	0.9	19.4	6
CLIMB OUT	85	2.2	0.878	0.047	0.9	16.7	3
APPROACH	30	4.0	0.314	0.073	3.4	8.7	2.5
IDLE	7	26.0	0.119	1.75	30.1	4.1	2.2
LTO TOTAL FUEL (kg) or EMISSIONS (g)			421	337	5988	4213	-
NUMBER OF ENGINES				1	1	1	1
NUMBER OF TESTS				3	3	3	3
AVERAGE D_p/F_{oo} (g/kN) or AVERAGE SN (MAX)				3.44	61	42.9	6
SIGMA (D_p/F_{oo} in g/kN, or SN)				0.37	3.8	0.81	0.8
RANGE (D_p/F_{oo} in g/kN, or SN)				3.01-3.67	57.6-65.1	42.4-43.9	5.4-6.9

FIG. 1.1 – Exemples de tableau d'émission obtenus à la suite de la certification d'un moteur civil par l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (source http ://www.qinetiq.com/aviation_emissions_databank).

Dans ce cadre, la réduction du niveau des rejets d'espèces polluantes est une préoccupation de tous les instants qui contraint à la recherche permanente de nouveaux concepts de chambre de combustion, source unique de tous les rejets d'espèces polluantes. La figure 1.1 présente un exemple de tableau typiquement établi dans le cadre de la certification d'un moteur civil et dont la réglementation indique quels sont les niveaux maximums admissibles pour les différentes espèces polluantes concernées. L'évolution de ces normes dans un sens toujours

plus restrictif conduit le motoriste à rechercher les solutions technologiques les plus adaptées que ce soit par l'amélioration continue de solutions techniques éprouvées ou par des ruptures technologiques permises par l'introduction de nouveaux matériaux ou concepts. Dans ce cadre, l'introduction de chambres de combustion où les processus chimiques se déroulent en régime dit Pauvre-Prévaporisé- Prémélangé ou PPP est une voie prometteuse qui est l'objet de nombreux développements technologiques et le sujet d'études à caractère plus fondamental. La figure 1.2 présente une coupe et une vue d'ensemble d'un injecteur utilisé dans de telles chambres. L'idée de base de ce concept est de pulvériser le plus rapidement possible le fuel injecté et de le vaporiser et de le mélanger avec de l'air dans un rapport tel que la combustion qui va ensuite se développer le fera en phase gazeuse et avec le moins possible d'hétérogénéités de richesse.

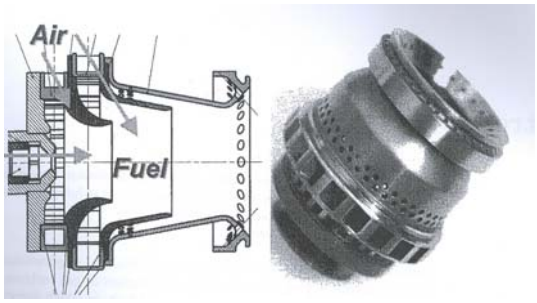

FIG. 1.2 – Plan et vue d'ensemble d'un injecteur de type pauvre-prévaporisé et prémélangé (D'après Kaufmann [43]).

Le développement d'instabilités spécifiques à ce type de combustion rend néanmoins délicate la mise au point des systèmes reposant sur ce type de concept. L'étude de Correa [21] précise bien dans ce domaine la problématique concernée ainsi que les enjeux. Afin de développer les moyens à mettre en oeuvre pour contrôler ou éliminer ces instabilités à grande échelle, de nombreuses études "amont" destinées à qualifier les outils de prévision avancés comme la simulation numérique des grandes échelles sont actuellement en cours (voir par exemple le travail tout récent de Truffin [76] à ce sujet). Afin de permettre le test de ces outils, il est nécessaire de disposer de base de données expérimentales obtenues pour des écoulements qui reproduisent les phénomènes "indésirables" associés aux systèmes en cours de développement. Dans ce cadre, Besson et al. [5] ont développé un banc d'essai dénommé ORACLES (acronyme pour **O**ne **R**ig for **A**ccurate **C**omparisons with **L**arge-**E**ddy Simulations) où une zone de combustion air-propane de type PPP à pression atmosphérique et présentant éventuellement une inhomogénéité de richesse est stabilisée par un élargissement brusque symétrique. Besson [4] a fourni une première étude des caractéristiques des écoulements obtenus avec ce banc et ses résultats ont été utilisés entre autres

par Bigot [6] afin de tester les capacités de prévision d'un modèle de combustion de type flammelette à richesse variable ou Duchamp de la Geneste [26] dans le cadre de la simulation des grandes échelles sur des maillages non structurés. Plus récemment, Nguyen et Bruel [14] ont entrepris, notamment dans le cadre du programme européen MOLECULES, de construire une base de données expérimentales sur des configurations d'écoulements soigneusement choisies de manière à reproduire, pour certains des écoulements réactifs considérés, une situation dans laquelle les caractéristiques instationnaires de l'écoulement présentent à la fois un caractère stochastique (turbulence) et déterministe (instabilité cohérente à grande échelle) de manière à permettre le test des stratégies de modélisation matures ou en cours de développement. C'est dans ce cadre que se situe notre travail qui est destiné à préciser les capacités de prévision d'une modélisation physique mature et d'en mettre en évidence les limites.

1.2 Objectifs de cette étude

Notre objectif de simulation numérique pourra être considéré *a priori* comme modeste. En effet, nous ne développerons pas ici de nouveaux modèles de combustion ou de turbulence ni de nouvelle méthode numérique. Nous entendons néanmoins apporter une contribution utile à la communauté scientifique et industrielle en proposant le test, sur une géométrie d'écoulement simple, d'une modélisation physique mature (et donc pas forcément très "raffinée") et utilisée intensivement en milieu industriel, afin d'en préciser les limites d'emploi dans le cadre de la simulation des écoulements pauvres prévaporisés et prémélangés. Le choix de ce couple, qui apparaît plus inhabituel que les associations usuelles du type (géométrie d'écoulement simple - modélisation physique complexe) ou (géométrie d'écoulement complexe - modélisation physique simple) est-t'il superflu ? À notre sens, la réponse est évidemment négative. En effet, il apparaît que sur les géométries complexes sur lesquelles on aimerait utiliser, à juste titre, les modélisations les plus sophistiquées et donc souvent gourmandes en ressources de calcul, les données expérimentales disponibles sont rares et permettent difficilement de tester les aspects spécifiques de la modélisation en question. C'est ce qui justifie en grande partie le recours à des géométries d'écoulements plus simples, mais mieux instrumentées, qui permettent elles, de tester les gains réels apportés par le modèle sophistiqué. Encore faut-t'il, pour estimer ces gains, disposer, sur ces mêmes géométrie d'écoulements simples, d'une "référence" obtenue avec l'utilisation d'une stratégie de modélisation "standard" et par rapport à laquelle on pourra alors "qualifier" la modélisation alternative proposée et quantifier les gains approtés en termes de qualité de prévision.

Ce mémoire est organisé en trois parties. La première partie, qui comporte trois chapitres, débute par la présentation de la géométrie d'écoulement qui nous intéresse (Chapitre 2), puis elle se poursuit par la description des caractéristiques des modèles de turbulence et de combustion utilisés (Chapitre 3) avant de se terminer par la description des méthodes numériques sur

lesquelles reposent les deux programmes de calcul utilisés (Chapitre 4). La seconde partie présente l'ensemble de nos résultats de simulation qui sont confrontés aux données expérimentales disponibles ainsi que la conclusion et la liste des références bibliographiques. Nous présentons au chapitre 5 le cheminement suivi afin de choisir précisément les conditions aux limites et certaines caractéristiques des maillages employés. Le chapitre 6 présente ensuite les résultats obtenus en ce qui concerne les écoulements inertes et le chapitre 7 présentent ceux obtenus pour les écoulements réactifs. Compte-tenu du nombre important d'écoulements que nous avons simulés, nous avons été confrontés au problème de la présentation d'un nombre très important de courbes et de champs de variables. Nous avons choisi de ne pas avoir recours à un recueil séparé de figures afin d'éviter des manipulations un peu fastidieuses pour le lecteur. Les nombreuses figures sont donc présentées au sein des différents chapitres concernés, au prix d'une "dilution" inévitable du texte. Enfin, les annexes sont regroupées dans la troisième et dernière partie de ce mémoire.

Première partie

Les outils employés

Chapitre 2

Principales caractéristiques des écoulements inertes et réactifs étudiés

La base de données expérimentale que nous emploierons pour évaluer la précision de nos simulations numériques a été constituée et structurée par Nguyen [54] et Bruel et Nguyen [14], en particulier dans le cadre du programme européen MOLECULES (**M**odelling **L**ow **E**mission **C**ombustors **U**sing **L**arge-**E**ddy **S**imulations). Ces données sont constituées de mesures de pression statique pariétale, de mesures de vitesse par vélocimérie Doppler laser à deux composantes simultanées en un point et à une composante en deux points. Ces résultats ont été obtenus sur le banc d'essai ORACLES (**O**ne **R**ig for **A**ccurate **C**omparisons with **L**arge-**E**ddy **S**imulations) construit en 1997 dans le cadre de la participation du Laboratoire de Combustion et de Détonique (LCD) au programme européen LES4LPP (Besson et al. [5]) et de la thèse de Besson [4]. Nous allons maintenant présenter rapidement ce banc d'essai ainsi que les principales caractéristiques des écoulements inertes et réactifs que nous allons simuler dans la suite de ce travail.

2.1 Description de la configuration d'écoulements

La géométrie d'écoulement d'ORACLES est celle d'une élargissement brusque symétrique, de section rectangulaire et dont les dimensions caractéristiques sont données sur la figure 2.1. Ce banc, à pression atmosphérique, est alimenté à température quasi-ambiante en air (écoulements inertes) ou en prémélange air+propane (écoulements réactifs). L'une des originalités de ce banc est d'avoir une double alimentation de la zone de combustion par deux écoulements turbulents de canal, ce qui permet de créer éventuellement une différence de richesse incidente et donc de permettre le développement éventuel d'une couche de mélange scalaire qui va interagir avec la zone de combustion. Les débits d'alimentation peuvent être également choisis indépendamment

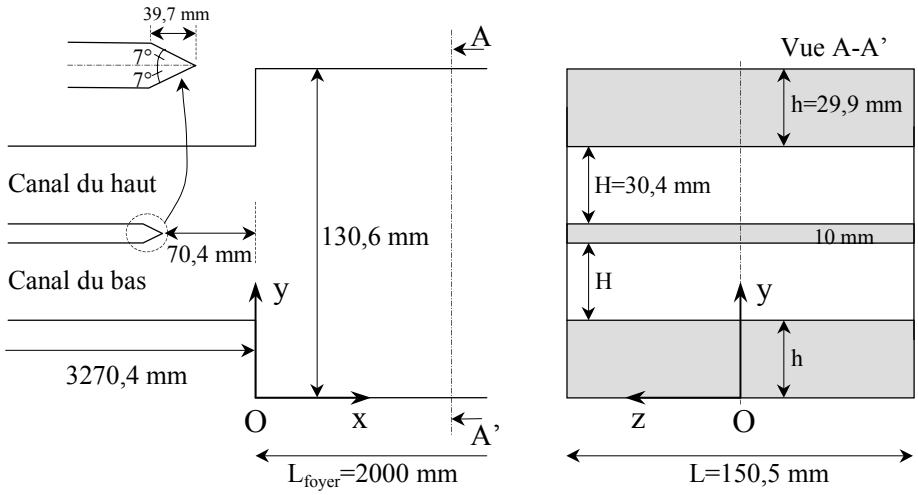

FIG. 2.1 – Banc d'essai ORACLES : géométrie et dimensions caractéristiques.

l'un de l'autre.

La photographie présentée sur la figure 2.2, permet de se rendre compte de la structure d'ensemble du banc d'essai avec notamment la section d'alimentation d'une longueur de trois mètres qui permet d'assurer un caractère pleinement développé aux écoulements turbulents d'alimentation. La figure 2.3 illustre parfaitement la nature des écoulements réactifs obtenus sur ce banc. Bien qu'intégrée sur l'envergure de l'écoulement, cette photo permet de distinguer les deux zones de réactions moyennes accrochées au niveau des deux marches qui forment l'élargissement brusque.

Parmi l'ensemble des différentes configurations d'écoulements étudiées expérimentalement par Nguyen [54] et Bruel et Nguyen [14], les paramètres principaux qui caractérisent chacun des écoulements sont :

- le débit massique Q, identique, de chaque canal d'alimentation.
- le nombre de Reynolds Re calculé sur la vitesse débitante $\mathbf{U}_b$ de chaque canal d'alimentation **:** Re $=\frac{Q}{\mu L}$, avec $L = 0,1505m$, la largeur de la section rectangulaire des canaux d'alimentation et μ le coefficient de viscosité dynamique de l'écoulement incident.
- Pour les écoulements réactifs, la richesse Φ de chacun des écoulements d'alimentation.

Un grand nombre de configurations d'écoulement a été étudié par Nguyen [54]. Tous les écoulements pour lesquels des mesures de vitesse ont été réalisées se caractérisent par un débit identique entre les deux canaux d'alimentation, variant de 65 g/s à 195 g/s, soit des valeurs de Re allant de 25000 à 75000. Les écoulements réactifs étudiés se répartissent en deux classes, celle des écoulements pour lesquels la teneur en propane est identique entre les deux canaux d'alimentation et celle pour lesquels elle ne l'est pas.

Nous allons maintenant indiquer quelles sont les propriétés principales de ces écoulements

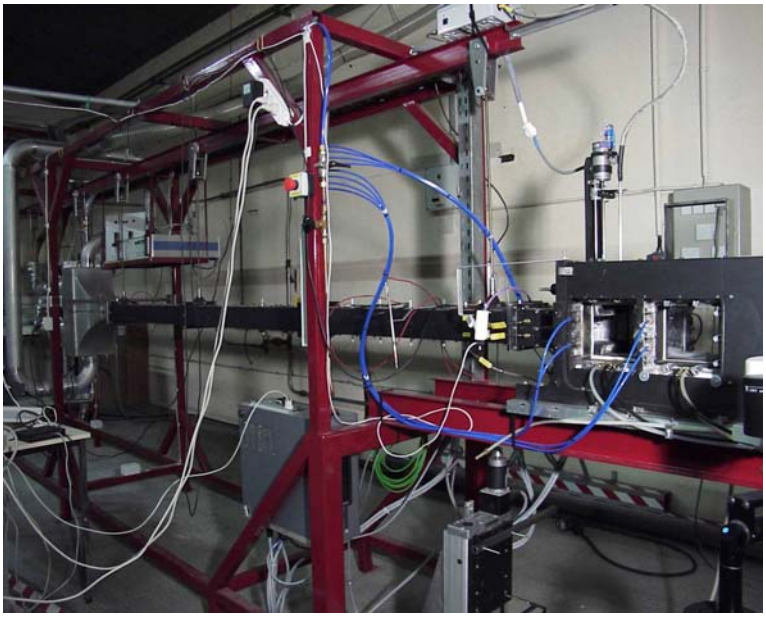

FIG. 2.2 – Banc d'essai ORACLES : Vue d'ensemble de la section d'alimentation et de la chambre de combustion.

telles que l'expérimentation les a révélées. Pour une description plus détaillée, le lecteur intéressé est invité à se reporter à la thèse de Nguyen [54].

2.2 Propriétés principales des écoulements obtenus sur ORACLES

2.2.1 Structure moyenne

La structure moyenne d'ensemble commune à tous les écoulements considérés est présentée schématiquement sur la figure 2.4 alors que la figure 2.5 précise les diverses abscisses auquelles les mesures de vitesses ont été effectuées par Nguyen [54]. Sur cette dernière figure, le système de coordonnées qui est utilisé et que nous reprendrons à notre compte est précisé ainsi que les diverses ordonnées correspondant à un certain nombre de points "repères" géométriquement importants, à savoir :

- l'ordonnée à mi-hauteur de la marche inférieure : $y = 0,5h$.
- l'ordonnée du nez de la marche inférieure : $y = 1h$.
- l'ordonnée de l'axe horizontal du canal d'alimentation inférieur : $y = 1,51h$.
- l'ordonnée de l'axe horizontal de la plaque séparatrice initiale, qui correspond au plan de symétrie horizontal de la géométrie d'ensemble : $y = 2,18h$.
- l'ordonnée de l'axe horizontal du canal d'alimentation supérieur : $y = 2,86h$.
- l'ordonnée du nez de la marche supérieure : $y = 3,37h$.
- l'ordonnée à mi-hauteur de la marche supérieure : $y = 3,87h$.

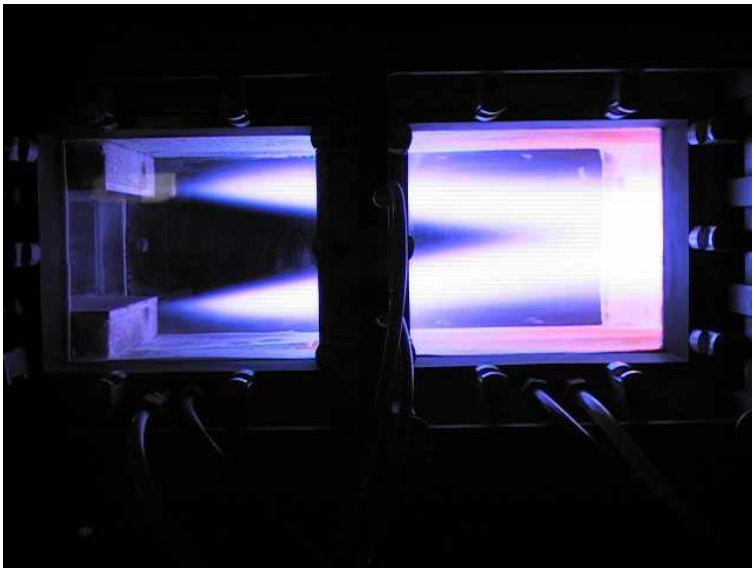

FIG. 2.3 – Banc d'essai ORACLES : photographie en lumière directe de la zone de combustion moyenne.

Au sein du champ de l'écoulement, on peut identifier deux zones "remarquables" qui sont :

- Les deux couches de cisaillement libres qui prennent naissance au nez de chacune des deux marches et dont les caractéristiques initiales sont reliées à celles des deux couches limites incidentes présentes au sein des deux écoulements d'alimentation au niveau des parois en $y = 1h$ et $y = 3,37h$. Ces deux couches de cisaillement libres vont se courber et se rattacher aux parois de la chambre conduisant ainsi au développement de deux couches limites pariétales en aval du point de recollement, tout en délimitant, en aval de chacune des deux marches, deux zones de recirculation moyennes. En ce qui concerne les écoulements inertes, ces deux zones présentent des longueurs très différentes pouvant être dans un rapport presque égal à deux. La présence de combustion conduit à une resymétrisation très nette de l'écoulement moyen accompagnée d'un raccourcissement important des zones moyennes de recirculation. Seul, l'écoulement réactif qui présente la plus forte différence de richesse incidente, exhibe une dissymétrie de l'écoulement moyen avec une zone de recirculation moyenne nettement plus courte du coté du canal d'alimentation le plus riche.
- La zone de sillage qui se développe à partir de la fin de la plaque séparant les deux écoulements d'alimentation et qui va ensuite interagir avec les deux couches de cisaillement. La zone de sillage conduit ainsi à la présence d'une zone centrale de vitesse déficitaire pour la composante longitudinale moyenne de la vitesse associée à un double pic des fluctuations associées.

Nguyen [54] a analysé en détail ses mesures de vitesses au niveau de ces deux zones, car il souligne que leur développement conditionne dans une large mesure la structure des écoulements

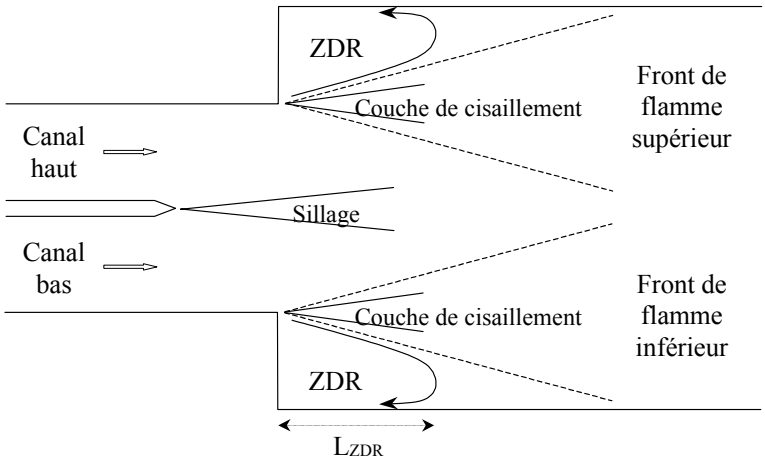

FIG. 2.4 – Banc d'essai ORACLES : représentation schématique de la structure moyenne de l'écoulement.

inertes mais également celle des écoulements réactifs, puisque c'est précisément au niveau des couches de cisaillement que se stabilisent, en moyenne, les deux fronts de flamme moyens qui forment la zone de combustion. Pour ce faire, il a en particulier utilisé les changements de variables classiques qui permettent, pour la couche de cisaillement plane et le sillage plan, de faire apparaître le caractère auto-semblable des profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne associé à ces structures particulières d'écoulement. Ses résultats montrent en particulier que malgré leur confinement, et pour tous les écoulements inertes et réactifs "traités" avec cette approche, les zones de sillage, tout au moins dans la zone proche de l'élargissement, se comportent d'une manière similaire à celle recherchée théoriquement. En ce qui concerne plus particulièrement les écoulements réactifs, Nguyen [54] observe que malgré les effets de l'accélération des écoulements liée au développement de la combustion, les profils de vitesse se regroupent de manière très homogène autour du profil théorique de similitude.

En ce qui concerne les couches de cisaillement des écoulements inertes, l'ensemble des profils obtenus se regroupent également de manière homogène autour du profil théorique. En ce qui concerne les écoulements réactifs, le constat est un peu plus réservé. En effet, bien que la morphologie des profils traités s'apparente clairement à celle du profil théorique, on note une dispersion importante des profils qui indique clairement que l'on atteint là les limites de cette recherche de comportement self-similaire. Cette dispersion apparaît logique si l'on considère le fait que les deux zones de réaction se stabilisent précisément au niveau des deux couches de cisaillement. Ainsi, l'hypothèse d'une masse volumique constante se trouve nécessairement être invalidée dès lors que la zone de combustion s'est suffisamment développée.

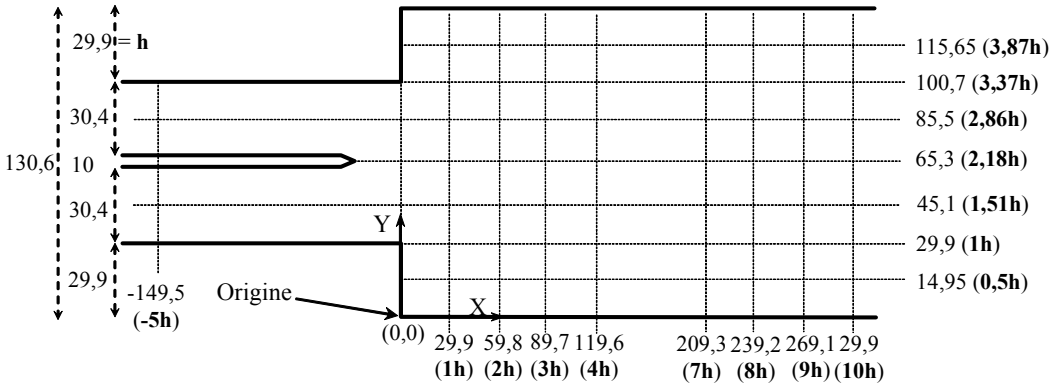

FIG. 2.5 – Banc d'essai ORACLES : positions des différentes abscisses pour lesquelles les profils de vitesse expérimentaux sont fournis et ordonnées associées à différents points "remarquables" de la géométrie (Dimensions en mm).

Cette manière de traiter les données expérimentales nous a paru très intéressante pour comparer précisément nos résultats numériques avec ceux issus de l'éxpérimentation. Il nous sera ainsi possible d'identifier si les propriétés d'auto-similarité ou d'écart à ces dernières telles qu'elles ont été relevées par Nguyen [54] sont également présentes dans les résultats issus de nos simulations numériques. En conséquence, nous rappelons maintenant les grandes lignes associées à ce traitement particulier des données ainsi que les hypothèses qui conditionnent la validité d'une telle approche. Plus de détails à ce sujet pourront être trouvés dans les livres de Chassaing [16] ou de Bailly et Comte-Bellot [1].

La figure 2.6 représente schématiquement ces deux objets physiques ainsi que les notations que nous utilisons. Dans les deux situations, on suppose que l'écoulement turbulent est en régime permanent, bidimensionnel en moyenne et à masse volumique constante. De plus, la contrainte de cisaillement $\overline{u'v'}$ s'exprime à travers l'emploi d'un coefficient de viscosité turbulente par $\overline{u'v'} = -\nu_t \frac{\partial \overline{u}}{\partial Y}$. Dans ces conditions, la recherche des propriétés de similitude est réalisée de la manière suivante :

- **Pour le sillage plan** : pour chaque X, on introduit la variable de similitude $\xi = (Y - Y_v)/\delta_{1/2}$ où Y_v désigne l'ordonnée de l'origine virtuelle du sillage ($X = 0$ et $Y = 0$ correspondant à l'origine physique de celui-ci) et où l'échelle $\delta_{1/2}$, dite épaisseur en déficit de vitesse moitié, est définie telle que :

$$\frac{U_\infty - \overline{u}(\delta_{1/2})}{U_d} = 0,5 \text{ avec } U_d = U_\infty - U_{min} \ll U_\infty$$

  où U_{min} est la vitesse moyenne sur l'axe du sillage qui est un minimum de par la nature de l'écoulement considéré et U_∞ est la vitesse de l'écoulement libre, supposée constante.

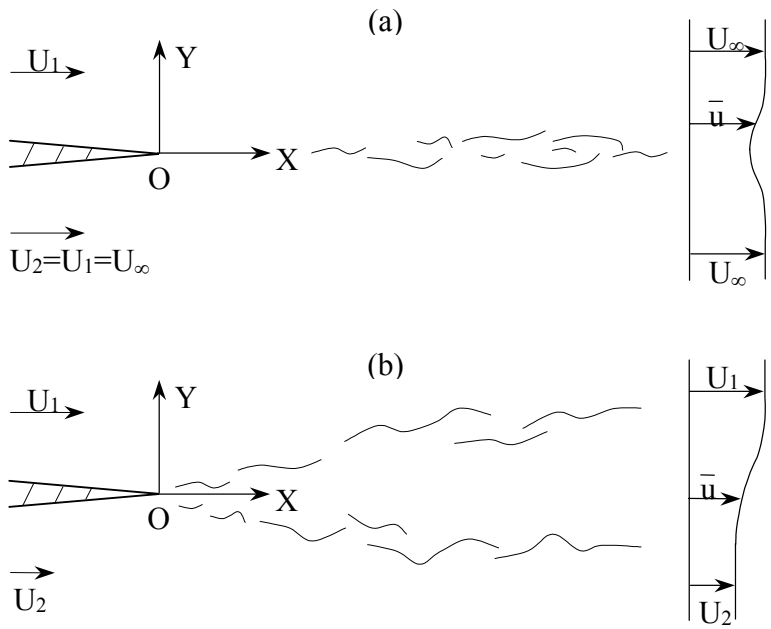

FIG. 2.6 – Représentation schématique des zones particulières de l'écoulement justiciables de la recherche d'un comportement self-similaire de la composante longitudinale de la vitesse moyenne : a) sillage plan ; b) couche de cisaillement (ou de mélange) plane.

La loi de similitude pour le profil de vitesse longitudinale est alors donnée par la relation suivante :

$$\frac{U_\infty - \overline{u}}{U_d} = e^{-(ln2)\left(\frac{Y-Y_v}{\delta_{1/2}}\right)^2} \tag{2.1}$$

Le coefficient $ln2$ intervenant dans l'expression 2.1 est directement associé au choix de la grandeur $\delta_{1/2}$ comme échelle spatiale caractéristique de la diffusion turbulente transverse. Les données expérimentales disponibles montrent que, tout au moins dans la zone centrale du sillage, ν_t est quasiment constant et que le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = \frac{U_d \delta_{1/2}}{\nu_t}$ est de l'ordre de $12,5$. Il est alors possible d'en déduire les lois d'évolution pour les échelles du sillage soit :

$$\begin{aligned} \frac{\delta_{1/2}}{\Theta} &= 0,274 \left(\frac{X - X_v}{\Theta}\right)^{1/2} \\ \frac{U_d}{U_\infty} &= 1,71 \left(\frac{X - X_v}{\Theta}\right)^{-1/2} \end{aligned} \tag{2.2}$$

où l'épaisseur de quantité de mouvement Θ, *a priori* constante dans le sillage libre, est définie par :

$$\Theta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\overline{u}}{U_\infty}\left(1 - \frac{\overline{u}}{U_\infty}\right) dY$$

Rappelons que l'on peut introduire également une autre échelle spatiale caractéristique,

qui est l'épaisseur de déplacement δ^* définie par :

$$\delta^* = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 - \frac{\overline{u}}{U_\infty}\right) dY$$

Pour la configuration de ORACLES, comme le montre la figure 2.5, le bord de fuite de la plaque séparatrice étant situé à ($x_{bf} = -70,4mm$, $y_{bf} = 65,3mm$), les coordonnées (X, Y) seront définies par :

$$\begin{aligned} X &= x - x_{bf} = x + 70,4 \\ Y &= y - y_{bf} = y - 65,3 \end{aligned} \tag{2.3}$$

L'abscisse X_v de l'origine virtuelle du sillage sera déterminée à partir de l'extrapolation pour $\delta_{1/2}/\Theta_0 \longrightarrow 0$ des courbes $\delta_{1/2}/\Theta_0$ tracées en fonction de x/Θ_0, où Θ_0 est l'estimation de Θ au niveau de l'élargissement brusque, soit $\Theta_0 = \Theta(x = 0)$. La vitesse U_∞ sera estimée comme étant la vitesse maximale observée, profil par profil, de part et d'autre du sillage. Enfin, signalons que la dissymétrie éventuelle de la zone de sillage due aux zones de recirculation de longueurs inégales sera compensée à chaque abscisse, en redressant si nécessaire le sillage sur l'axe de la veine, c'est à dire en translatant chaque profil de vitesse dans la direction Oy, de manière à ce que la vitesse minimale de chaque profil soit obtenue en $y = 2,18h$.

– **Pour la couche de cisaillement plane :** Le champ de vitesse moyenne est caractérisé par l'échelle de vitesse de convection moyenne initiale $U_{conv} \sim U_m = (U_1 + U_2)/2$ et par l'amplitude de la perturbation initiale donnée par la différence de vitesse $U_1 - U_2$ (en supposant $U_1 > U_2$). Pour chaque X, on introduit la variable de similitude $\eta = (Y - Y_v) / (X - X_v)$ où X_v et Y_v sont les coordonnées de l'origine virtuelle de la couche de cisaillement. La loi de similitude pour le profil de vitesse longitudinale est alors donnée par la relation suivante :

$$\frac{\overline{u}}{U_1} = \frac{1 + U_2/U_1}{2} \left(1 + \frac{U_1 - U_2}{U_1 + U_2} erf\left(\sigma\eta\right)\right) \tag{2.4}$$

avec

$$erf(\sigma\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sigma\eta} e^{-\varepsilon} d\varepsilon$$

où le paramètre d'expansion σ, constant, est exprimé à partir de l'épaisseur de vorticité $\delta_\omega = \frac{U_1 - U_2}{\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial Y}\right)_{max}}$. En effet, comme cette dernière évolue linéairement dans la zone de similitude, soit :

$$\delta_\omega = \frac{\sqrt{\pi}}{\sigma} \left(X - X_v\right)$$

le paramètre d'expansion s'obtient alors à partir de la dérivation en fonction de X de l'expression ci-dessus, ce qui conduit à :

$$\sigma = \frac{\sqrt{\pi}}{\delta'_\omega} \text{ avec } \delta'_\omega = \frac{d\delta_\omega}{dX}$$

Compte-tenu du positionnement sur ORACLES des coins de marche à partir desquels se développent les couches de cisaillement supérieure et inférieure (voir sur la figure 2.5), les coordonnées (X, Y) seront définies par :

Pour la couche de cisaillement supérieure : $X = x - x_{cms} = x$; $Y = y - y_{cms} = y - 100,7$

Pour la couche de cisaillement inférieure : $X = x - x_{cmi} = x$; $Y = y - y_{cmi} = y - 29,9$

où les indices $_{cms}$ et $_{cmi}$ se rapportent respectivement aux coins de marche supérieur et inférieur. Les valeurs de U_1 et de U_2 seront déterminées, pour chaque profil traité, comme étant respectivement les valeurs maximales et minimales observées de part et d'autre de la couche, avec donc la possibilité d'avoir une vitesse minimale négative du fait de la présence des zones de recirculation. Pour chaque abscisse, la détermination de $\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial Y}\right)_{max}$intervenant dans l'expression de l'épaisseur de vorticité sera effectuée au niveau du point d'inflexion du profil de vitesse, l'ordonnée de ce même point d'inflexion fournissant également l'ordonnée Y_v de l'origine virtuelle de la couche. L'abscisse X_v de cette dernière sera déterminée à partir de l'extrapolation, pour $\delta_\omega \to 0$ de l'évolution de δ_ω en fonction de x.

Les résultats que nous avons obtenus grâce à l'application de ce traitement seront présentés dans la deuxième partie de ce mémoire. Poursuivant avec les propriétés des écoulements étudiés expérimentalement par Nguyen [54], on relève, entre autres, les tendances importantes suivantes :

1. **Pour les écoulements d'alimentation en** $x = -5h$: en l'absence de combustion dans la veine d'essai, leurs propriétés sont proches de celles d'écoulements de canal turbulents développés. En présence de combustion, si les profils de vitesse moyenne restent semblables à ceux mesurés en inerte, il apparaît que les fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse augmentent de manière très importante, pouvant dans certains cas représenter jusqu'à plus de 90 % de l'énergie des fluctuations. Cette augmentation est attribuée à la présence d'un mouvement de battement synchrone des fronts de flamme suivant un mode de type variqueux qui induit un mouvement de type piston au niveau des écoulements d'alimentation. L'énergie de ce mouvement est néanmoins fortement dépendante de la configuration d'écoulement (débit, richesse ou gradient de richesse).
2. **En aval de l'élargissement brusque** :

   Pour les écoulements inertes

   On observe que si les profils de la composante longitudinale de la vitesse sont rapportés à la vitesse débitante $\mathbf{U}_b$ de chaque canal d'alimentation, une augmentation du débit n'a qu'une influence marginale sur la morphologie qualitative du champ des vitesses moyennes.

   Pour les écoulements réactifs

   Influence d'une variation de débit à richesse fixée : pas de modification qualitative de la structure d'ensemble. En revanche, la longueur, quasi-identique, des zones de recirculation

moyenne, est une fonction fortement croissante du débit. Ainsi, un triplement de ce dernier conduit à un allongement de ces zones de l'ordre de 180 %.

Influence d'une variation de richesse à débit fixé : la longueur, identique, des deux zones de recirculation moyenne est une fonction fortement décroissante de la valeur de la richesse. Ainsi, on passe d'une longueur de près de cinq fois la hauteur de marche pour une richesse incidente de $0,65$ à une longueur d'un peu plus du double de cette même hauteur pour une richesse injectée de 0,85. Pour les écoulements dont la richesse varie de 0,65 à 0,85, on observe l'apparition d'un bruit de ronflement important qui correspond à l'excitation acoustique de certains modes du banc d'essai avec, en corollaire, des niveaux de fluctuations de vitesse très élevés pour les deux composantes mesurées. La figure 2.7 présente ainsi certains des différents aspects que peut alors prendre la morphologie de la zone de réaction instantanée juste en aval de l'élargissement et qui peuvent être très différents de ceux de la zone de réaction moyenne présentée précédemment sur la figure 2.3.

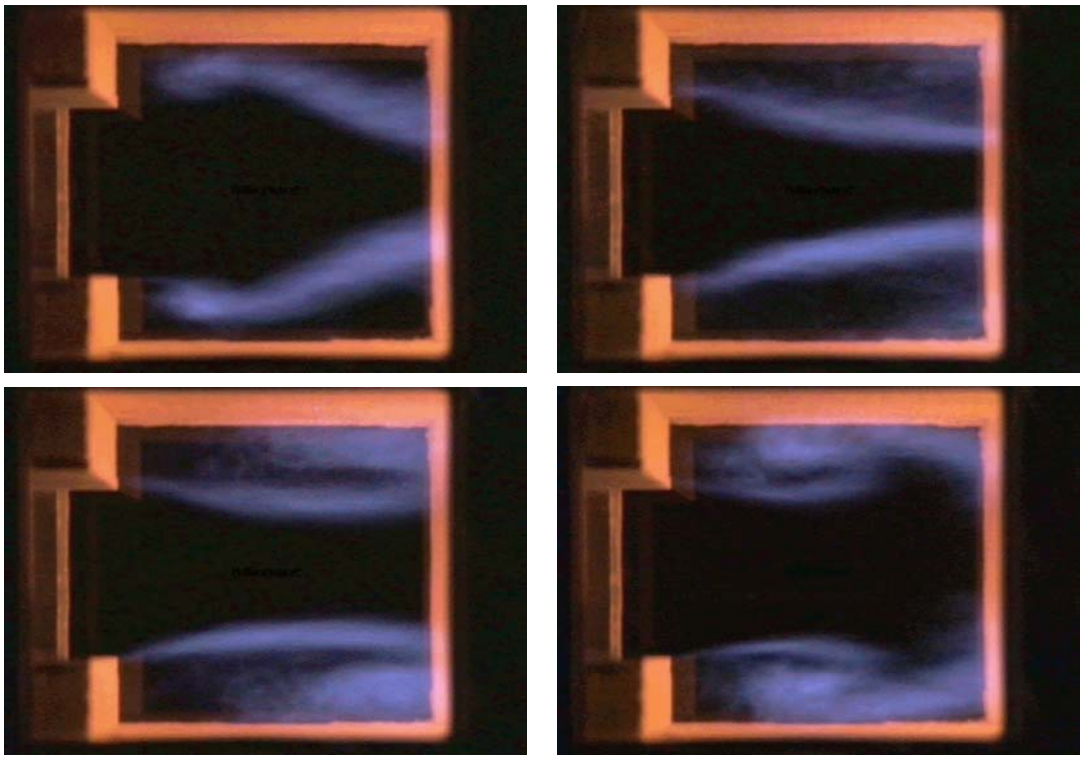

FIG. 2.7 – Banc d'essai ORACLES : visualisations à court temps de pose (1/500 de seconde) de la zone de réaction.

1. *Influence d'un différentiel de richesse initiale pour des écoulements de même puissance thermique :* les deux écoulements qui présentent une différence de richesse incidente diffèrent notablement dans leur structure moyenne par rapport à leur équivalent de même puissance mais de richesse uniforme avec notamment une certaine dissymétrisation de

		Re		$Q(g/s)$		$\mathbf{U}_{déb}(m/s)$		Φ	
		Canal		Canal		Canal		Canal	
Type	**Label**	**Sup.**	**Inf.**	**Sup.**	**Inf.**	**Sup.**	**Inf.**	**Sup.**	**Inf.**
Inerte	nc_1	25000	25000	65	65	11	11	–	–
Inerte	nh_1	50000	50000	130	130	22	22	–	–
Inerte	$nm1$	75000	75000	195	195	33	33	–	–
Réactif	c_1	25000	25000	65	65	11	11	$0,75$	$0,75$
Réactif	c_2	25000	25000	65	65	11	11	$0,70$	$0,80$
Réactif	c_3	25000	25000	65	65	11	11	$0,65$	$0,85$
Réactif	h_1	50000	50000	130	130	22	22	$0,75$	$0,75$
Réactif	$m1$	75000	75000	195	195	33	33	$0,75$	$0,75$

TAB. 2.1 – Valeurs des principaux paramètres des écoulements retenus pour nos simulations numériques (Température et niveau de pression des écoulements d'alimentation : 300 K et 1 bar).

l'écoulement moyen au niveau des zones de recirculation. L'énergie du mouvement cohérent semble également être sensible à la différence de richesse notamment en ce qui concerne les fluctuations de la composante transverse de la vitesse.

2.3 Écoulements retenus pour nos simulations numériques

L'idéal ici eût été bien sûr de calculer l'ensemble des écoulements étudiés expérimentalement sur ORACLES. Les difficultés rencontrées pour la réalisation de nos simulations numériques et la durée nécessairement limitée dévolue à cette étude nous ont contraint à restreindre la palette des écoulements simulés et de n'en choisir que quelques uns. Nous avons tout d'abord retenu les écoulements étudiés dans le cadre du programme européen MOLECULES, car ceux-ci sont destinés à servir de base de test pour l'élaboration de modélisations avancées basées sur des méthodes de type simulations numériques des grandes échelles (nous retiendrons l'acronyme anglais LES pour désigner ce type d'approche), et nos résultats de calcul fourniront alors une référence de base permettant d'estimer le gain en précision réellement apporté par ces techniques LES en ce qui concerne bien sûr les grandeurs communes accessibles également à notre approche de type "Reynolds Averaged Navier-Stokes" (RANS). Ces quatre écoulements MOLECULES ont été labellés dans ce cadre nc_1 pour l'écoulement inerte et c_1, c_2 et c_3 pour les écoulements réactifs. Ces écoulements sont caractérisés par un débit d'alimentation identique et les trois écoulements réactifs, de même puissance thermique, se différencient par la différence de richesse incidente entre les deux écoulements d'alimentation qui va de 0 pour le cas c_1 (donc à richesse constante) à $0,2$ pour le cas le plus hétérogène c_3. L'écoulement inerte nc_1 joue le rôle d'écoulement de

Type	Label	Puissance totale dégagée (kW)	Longueur de la zone de recirculation	
			Supérieure	Inférieure
Inerte	nc_1	–	$8h$	$5,5h$
Inerte	nh_1	–	$10h$	$5,5h$
Inerte	$nm1$	–	$9,5h$	$5,5h$
Réactif	c_1	220	$2,3h$	$2,3h$
Réactif	c_2	221	$2,5h$	$2,3h$
Réactif	c_3	219	$2,8h$	$1,9h$
Réactif	h_1	440	$3,5h$	$3,4h$
Réactif	$m1$	660	$4,9h$	$4,2h$

TAB. 2.2 – Écoulements inertes et réactifs simulés : puissance thermique totale dégagée et valeurs expérimentales de la longueur des zones de recirculation moyennes.

référence destiné à illustrer l'influence de la présence de combustion sur les caractéristiques de la structure de l'écoulement. Nous avons sélectionné deux autres écoulements réactifs, labellés h_1 et $m1$, afin de déterminer le degré de capacité de notre approche à prévoir correctement l'influence d'une variation de débit à richesse fixée et nous simulerons également les deux écoulements inertes qui leur correspondent en terme de débit respectivement dénommés nh_1 et nm_1. Nous ne considérerons pas ici les écoulements réactifs qui permettraient d'évaluer les capacités de prévision en ce qui concerne l'influence d'une variation de richesse à débit fixé. Les paramètres qui définissent ces écoulements sont regroupés dans le tableau 2.1 alors que le tableau 2.2 indique les valeurs de puissance thermique dégagée pour les écoulements réactifs retenus ainsi que la longueur des zones de recirculation déterminée expérimentalement.

2.4 Les données expérimentales ORACLES au sein de la base de données MOLECULES

Les données expérimentales que nous utiliserons et relatives aux écoulements nc_1, c_1, c_2 et c_3 ont été regroupées par Bruel et Nguyen [14] dans une base de données qui constitue un sous ensemble de la base de données expérimentales et numériques MOLECULES. Ces données, obtenues sur ORACLES, sont regroupées en quatre sous-ensembles ("set 1, 2-1, 2-2 et 2-3") qui ont été structurés de manière à être exploitées de la manière la plus rapide et efficace possible. Un exemple de l'arborescence retenue à cet effet est présenté sur la figure 2.8 en ce qui concerne les grandeurs moyennes de l'ensemble 2-1. On observe que le cheminement de l'utilisateur à travers cette base de données est grandement facilité par l'emploi d'appellations signifiantes pour

chaque répertoire, ce qui, combiné à la présence de nombreux fichiers d'explication "README", permet d'exploiter véritablement cette base sans difficulté et en toute autonomie. Notons que cette base fournit également les données brutes issues des mesures par vélocimétrie laser, ce qui donne la possibilité de re-traiter ces données si un besoin spécifique se faisait sentir. Indiquons

```
SET_2-1
+---DATA
|   +---Processed_Data
|   |   \---Velocity
|   |       +---Simultaneous_measurements_UV
|   |       |   +---Combustor
|   |       |   |   \---Profiles_uv_Correlation
|   |       |   |       +---Case_c1
|   |       |   |       +---Case_c2
|   |       |   |       +---Case_c3
|   |       |   |       \---Case_nc1
|   |       |   +---Dump_plane
|   |       |   |   \---Profiles_uv_Correlation
|   |       |   \---Inlet_channels
|   |       |       +---Lower_channel
|   |       |       |   \---Profiles_uv_Correlation
|   |       |       \---Upper_channel
|   |       |           \---Profiles_uv_Correlation
|   |       \---Transverse_Component_V
|   |           +---Combustor
|   |           |   +---Profiles
|   |           |   |   +---Case_c1
|   |           |   |   +---Case_c2
|   |           |   |   +---Case_c3
|   |           |   |   \---Case_nc1
|   |           |   \---Triple_decomposition
|   |           |       +---x=10h
|   |           |       +---x=1h
|   |           |       +---x=2h
|   |           |       +---x=3h
|   |           |       +---x=4h
|   |           |       +---x=7h
|   |           |       +---x=8h
|   |           |       \---x=9h
|   |           +---Dump_plane
|   |           |   +---Profiles
|   |           |   \---Triple_decomposition
|   |           \---Inlet_channels
|   |               +---Lower_channel
|   |               |   \---Profiles
|   |               \---Upper_channel
|   |                   \---Profiles
```

FIG. 2.8 – Base de données MOLECULES : exemple d'aborescence de la base de données ORACLES (ici le "set 2-1") constituée dans le cadre du programme de recherche européen MOLECULES et utilisée pour tester la précision de nos simulations numériques.

enfin, qu'au sujet de cette base de données expérimentales, il nous apparaît très souhaitable, qu'à l'avenir, les données très détaillées caractérisant le champ des vitesses soient complétées, pour les mêmes conditions d'écoulements, par des mesures, tout aussi exhaustives, de grandeurs scalaires comme la température, les concentrations en espèces chimiques ainsi que par des visualisations, par fluorescence induite par laser par exemple, permettant de cartographier le champ de richesse (pour les écoulements à richesse non uniforme) ou de visualiser les zones instantanées de réaction. La mise à disposition de la communauté scientifique de telles données, regroupées dans une base

aisément exploitable et pérennisées dans le temps, comme c'est le cas de la base de données issue du programme européen MOLECULES, est en effet un atout précieux pour le test et l'amélioration des modèles physiques associés à ce type d'écoulement.

Chapitre 3

Les modèles physiques employés

Dans ce chapitre, nous détaillons les principes sur lesquels s'appuie l'établissement des équations de bilan et des modèles de fermeture associés qui ont été utilisés et effectivement résolus afin de mener à bien nos simulations d'écoulements turbulents inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique.

3.1 Pour la turbulence

3.1.1 Introduction

Le régime de l'écoulement que nous considérons est fortement turbulent avec un nombre de Reynolds variant typiquement de 25000 à 75000. Le développement non-linéaire des instabilités hydrodynamiques nous conduit ainsi *a priori* à devoir idéalement considérer une multitude de structures tourbillonnaires s'étendant sur une gamme très large d'échelles spatiales et temporelles. La résolution de celles-ci par simulation directe ou simulation des grandes échelles reste encore bien au-delà des possibilités de calcul offertes dans le cadre d'une application industrielle. Aussi notre travail s'inscrit dans le cadre d'une approche RANS ("Reynolds Average Navier-Stokes") qui reste un outil privilégié d'étude numérique pour la configuration d'écoulement que nous considérons. Cette approche consiste à ne simuler que la structure moyenne de l'écoulement en modélisant les effets des fluctuations des diverses grandeurs.

Modélisation de la turbulence

Dans cette section, nous détaillons les équations moyennes qui découlent de cette approche, ainsi que les modèles effectivement utilisés pour la fermeture des termes inconnus. Ces termes apparaissent lors du passage à la moyenne des équations instantanées dans lesquelles les variables sont recherchées sous la forme de la somme d'une moyenne et d'une fluctuation.

Nous nous intéressons tout d'abord au modèle au premier ordre à deux équations k-ε à haut nombre de Reynolds, de Jones et Launder [41], dans sa formulation incompressible puis dans

sa formulation compressible. L'utilisation de ce modèle initialement conçu pour les écoulements incompressibles repose sur l'analogie de Boussinesq selon laquelle les contraintes turbulentes peuvent être reliées au champ moyen de façon similaire aux contraintes visqueuses grâce à la détermination d'un coefficient de viscosité turbulente qui est alors introduit. Par analyse dimensionelle, la viscosité turbulente ν_t s'exprime alors, suivant cette analogie, en fonction d'une échelle de vitesse proportionnelle à la racine carrée de l'énergie cinétique turbulente et d'une échelle de temps donnée par le rapport de cette énergie cinétique turbulente sur son taux de dissipation. Afin de calculer les effets de proche paroi, le modèle k-ε à haut nombre de Reynolds a subi des modifications qui sont à l'origine des modèles k-ε dits à bas nombre de Reynolds. Parmi ces modèles qui utilisent des fonctions d'amortissement afin de prendre en compte ces effets, nous présentons en particulier le modèle de Chien [17] qui est intégré dans le programme de calcul Jason2D utilisé pour choisir au mieux la distance aux parois à laquelle les maillages N3SNatur devaient être positionnés.

3.1.2 Les équations instantanées

Les équations instantanées décrivant le comportement d'un fluide en mouvement[1], résultent de l'application des principes fondamentaux de la mécanique classique et de la thermodynamique. Ces équations instantanées définissent comment chaque grandeur conservative varie temporellement et spatialement sous l'action des mécanismes de convection, de diffusion, de création et de destruction. Pour leur établissement, on considère l'hypothèse du milieu continu[2]. Les équations instantanées classiques de la mécanique des milieux continus, dans un repère cartésien et sous l'hypothèse de fluide parfait pour un mélange de gaz à chaleurs spécifiques constantes s'écrivent sous la forme suivante :

• Équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \tag{3.1}$$

• Bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \tag{3.2}$$

les composantes du tenseur des contraintes visqueuses étant données par :

$$\tau_{ij} = \mu \mathcal{S}_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial v_\kappa}{\partial x_\kappa} \right) \delta_{ij} \right] \tag{3.3}$$

[1] Leur établissement est détaillé dans l'annexe A.

[2] L'hypothèse de milieu continu inscrite dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local suppose en particulier que la plus petite des échelles spatiales de gradient considérées pour les mouvements macroscopiques est beaucoup plus importante que le libre parcours moyen moléculaire.

où μ est la viscosité moléculaire évaluée suivant la loi empirique de Sutherland [3].

• Bilan d'énergie totale $\mathcal{E}$:

$$\frac{\partial \rho \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_i \mathcal{E})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + v_i \tau_{ij}\right] + w_T \tag{3.4}$$

où λ est la conductivité thermique dont l'évaluation est ramenée à celle de la viscosité moléculaire via l'introduction d'un nombre de Prandtl constant, et où le terme w_T représente l'apport d'énergie dû aux réactions chimiques et se définit selon :

$$w_T = -\sum_{\alpha=1}^{n} \omega_\alpha \Delta h_\alpha^0 \tag{3.5}$$

• L'équation de l'énergie peut également être introduite à partir du bilan d'enthalpie :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\rho D \frac{\partial h}{\partial x_i} - \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{\lambda}{C_p} - \rho D_\alpha\right) h_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}\right] \tag{3.6}$$

où n est le nombre d'espèces considérées et où l'enthalpie[4] est donnée par :

$$h = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \left(h_\alpha^0 + \int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT\right) Y_\alpha \tag{3.7}$$

• Bilan massique de l'espèce α :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i Y_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}\right) + \omega_\alpha \qquad \alpha = 1, ..., n\ , \tag{3.8}$$

Ce système peut alors être fermé en introduisant l'équation d'état du gaz parfait, soit :

$$p = \rho R T \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \frac{Y_\alpha}{M_\alpha}. \tag{3.9}$$

La pression est alors en effet recalculée selon :

$$p = (\gamma - 1)\, \rho C_v T \tag{3.10}$$

où γ est le rapport des chaleurs spécifiques, supposé constant. Notons finalement que le flux de chaleur est exprimé par la loi de Fourier et que l'énergie totale s'exprime alors par (voir l'expression A.21 en annexe) :

[3] Dans le cas d'un mélange de n espèces, la viscosité moléculaire du mélange est évaluée à l'aide de la loi empirique de Wilke [7].

[4] L'entalpie totale est alors donnée par :

$$H_T = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \left(h_\alpha^0 + \int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT\right) Y_\alpha + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} v_i^2,$$

où h_α^0 est l'enthalpie de formation et $\int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT$ est l'enthalpie spécifique de l'espèce α.

$$\mathcal{E} = e + \frac{1}{2} v_i v_i \tag{3.11}$$

3.1.3 Principes de l'approche statistique

Les moyennes d'ensemble et temporelle

La moyenne d'une variable instantanée $\Phi(x_i, t)$ peut être définie comme la moyenne statistique $< \Phi > (x_i, t)$, d'un ensemble de N réalisations $\Phi_n(x_i, t)$ indépendantes[5], soit :

$$< \Phi > (x_i, t) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \Phi_n(x_i, t) \tag{3.12}$$

Nous faisons l'hypothèse d'ergodicité selon laquelle cette moyenne s'identifie à la moyenne temporelle $\hat{\Phi}(x_i, t)$ mesurable expérimentalement en intégrant $\Phi(x_i, t)$, sur un intervalle de temps T suffisamment grand par rapport aux échelles de temps de la turbulence :

$$\hat{\Phi}(x_i, t) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \Phi(x_i, t) \; dt$$

La moyenne de *Reynolds*

Nous utilisons dans un premier temps le formalisme de la décomposition de Reynolds [35]. Une variable instantanée $\Phi(x_i, t)$, peut être séparée en une partie moyenne et une partie fluctuante selon :

$$\Phi(x_i, t) = \bar{\Phi}(x_i, t) + \Phi'(x_i, t)$$

où $\Phi'(x_i, t)$ est la partie de $\Phi(x_i, t)$ fluctuant de manière centrée autour de sa moyenne dite de Reynolds $\bar{\Phi}(x_i, t)$.

La moyenne de Favre

La moyenne de Favre $\tilde{\Phi}(x_i, t)$ [28], dite pondérée par la masse volumique ρ, est une autre type de moyenne, définie à partir de la moyenne de Reynolds, par :

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho \Phi}}{\bar{\rho}}, \text{ avec } \Phi(x_i, t) = \tilde{\Phi}(x_i, t) + \Phi''(x_i, t) \text{ et } \widetilde{\Phi''} = 0 \text{ mais } \overline{\Phi''} \neq 0 \tag{3.13}$$

[5] Pour une variable aléatoire Φ continue à valeurs réelles, cette moyenne peut aussi être déterminée à l'aide d'une densité de probabilité $\mathcal{P}(\Phi)$ de Φ. $\mathcal{P}(\Phi) d\Phi$ représente alors la probabilité que la variable Φ prenne une valeur comprise dans l'intervalle $[\Phi, \Phi + d\Phi]$ de l'ensemble des réalisations, soit :

$$< \Phi > (x_i, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi \mathcal{P}(\Phi) d\Phi$$

L'utilisation de cette moyenne présente l'avantage de faire apparaître moins de termes de couplage dans les équations de bilan pour la description des écoulements moyens à masse volumique variable. Pour les écoulements à masse volumique constante, la moyenne de Reynolds et la moyenne de Favre sont identiques.

3.1.4 Les équations moyennes

Introduction au modèle $k-\varepsilon$ incompressible

Si l'on applique le formalisme de la décomposition en moyenne de Reynolds sur l'ensemble des variables dépendantes en incompressible, soit pour la température T et les composantes u_i du vecteur vitesse $\mathbf{U}$, soit :

$$\begin{cases} T = \overline{T} + T' \\ u_i = \overline{u_i} + u_i' \end{cases}$$

et que l'on injecte cette décomposition dans les équations de Navier-Stokes, l'application de l'opérateur de moyenne à ce système nous amène alors à considérer le nouveau problème suivant :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\overline{v_i}) = 0 \\ &\frac{\partial(\rho\overline{v_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\overline{v_i v_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{\tau_{ij}} - \rho\overline{v_i' v_j'}\right] \end{aligned} \tag{3.14}$$

Le système obtenu est identique au système original, exception faite du terme supplémentaire de contraintes turbulentes $-\rho\overline{v_i' v_j'}$ apparaissant dans l'équation de transport de la quantité de mouvement. L'approche retenue consiste alors à "fermer" le terme $-\rho\overline{v_i' v_j'}$ par analogie avec la loi de Boussinesq utilisée pour exprimer les contraintes visqueuses en considérant que $-\rho\overline{v_i' v_j'}$ est localement proportionnelle à la déformation du champ moyen, soit :

$$-\rho\overline{v_i' v_j'} = 2\mu_t\overline{S_{ij}} - \frac{2}{3}\rho k\delta_{ij} \tag{3.15}$$

où les moyennes $\overline{S_{ij}}$ des composantes du tenseur de déformation sont données par :

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{v_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{v_j}}{\partial x_i}\right)$$

et où μ_t est le coefficient de viscosité turbulente, analogue à la viscosité μ pour les contraintes visqueuses. Pour cette approximation, le terme isotrope $\frac{2}{3}\rho k\delta_{ij}$ est nécessairement introduit afin que la trace invariante du tenseur des contraintes turbulentes soit effectivement égale au double de l'énergie cinétique turbulente k. Ce terme est similaire au terme présent dans la relation 3.3. Il s'identifie alors à une pression dynamique supplémentaire induite par le mouvement turbulent conduisant à un terme de pression effective de la forme $p^* = \bar{p} + \frac{2}{3}\rho k$. Le bilan de quantité de mouvement se réécrit alors selon :

$$\frac{\partial(\rho\overline{v_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\overline{v_i v_j})}{\partial x_j} = -\frac{\partial p^*}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[(\mu+\mu_t)\frac{\partial\overline{v_i}}{\partial x_j}\right] \tag{3.16}$$

Le modèle utilisé consiste ainsi à évaluer μ_t, par analogie avec μ, comme le produit d'une échelle turbulente de vitesse v_t et d'une échelle turbulente de longueur l_t. Dès lors, μ_t n'est plus dépendant de la nature du fluide, mais simplement dépendant des propriétés dynamiques locales de l'écoulement.

Équation de transport de l'énergie cinétique de la turbulence L'échelle de vitesse est classiquement donnée par $\sqrt{k}$, une équation de transport pour l'énergie cinétique de turbulence pouvant s'obtenir avec une relative simplicité (voir par exemple Chassaing [16] ou Pope [62]) :

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}}_{\mathcal{A}_k} + \underbrace{\frac{\partial(\rho k \overline{v_j})}{\partial x_j}}_{\mathcal{C}_k} = \underbrace{-\rho\overline{v_i'v_j'}\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j}}_{\mathcal{P}_k} \underbrace{-\overline{\tau_{ij}'\frac{\partial v_i'}{\partial x_j}}}_{\varepsilon} \underbrace{-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho v_i'v_i'v_j'}\right) - \overline{v_i'\frac{\partial p'}{\partial x_i}} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{v_i'\tau_{ij}'})}_{\mathcal{D}_k} \tag{3.17}$$

Dans l'équation de transport précédente, $\mathcal{A}_k$ et $\mathcal{C}_k$ sont respectivement les termes d'accumulation et de flux convectifs. La création ou la disparition d'énergie cinétique turbulente moyenne est due aux termes de production $\mathcal{P}_k$ (transférant l'énergie du champ moyen au champ turbulent), au taux de dissipation ε (dissipant l'énergie turbulente à petite échelle) et au terme $\mathcal{D}_k$ qui représente la diffusion de k par les fluctuations de vitesse, de pression et des contraintes visqueuses. Le terme de production $\mathcal{P}_k$ est modélisé en réintroduisant la fermeture de Boussinesq pour l'expression des contraintes $\rho\overline{v_i'v_j'}$ et se réécrit alors :

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_k &= -\rho\overline{v_i'v_j'}\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}\left(\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{v_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}k\right)\frac{\partial \overline{v_i}}{\partial x_j} \\ &= 2\mu_t \overline{S_{ij}}^2\end{aligned}$$

Dans le modèle $k-\varepsilon$, on modélise le terme de diffusion de l'énergie cinétique turbulente $\frac{1}{2}\left(\overline{\rho v_i'v_i'v_j'}\right)$ par une fermeture du type gradient proportionnelle à $\mu_t\frac{\partial k}{\partial x_j}$. La corrélation pression-vitesse est d'autant moins facile à modéliser que l'on ne dispose pas d'information expérimentale permettant d'évaluer son comportement exact. Ce terme est alors artificiellement inclus dans le terme modélisé de la diffusion de k. Les termes diffusifs sont regroupés et réexprimés sous la forme d'un terme de flux diffusif de $p+\rho k$ qui est alors fermé par une schématisation de type gradient [16] :

$$\mathcal{D}_k = -\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\overline{(p+\rho k)v_j'}\right] = \frac{\nu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}$$

le coefficient de diffusivité d_k de k étant ici exprimé par $d_k = \nu_t/\sigma_k$ en introduisant le nombre de Prandtl/Schmidt de turbulence σ_k de l'énergie cinétique de turbulence, supposé constant et égal à un.

Il n'est pas possible de déduire directement des équations de Navier-Stokes une équation de transport pour l'échelle de longueur turbulente l_t. L'ensemble des fermetures en un point à deux

équations de transport consiste alors à déduire indirectement cette échelle de longueur à partir de la dissipation correspondant à une combinaison du type $k^m l_t^n$. Par analyse dimensionnelle, Jones et Launder [41] ont retenu les valeurs de $m = 3/2$ et $n = -1$, afin de dériver une équation de transport pour le terme de dissipation ε apparaissant explicitement dans l'équation de transport pour k. Cependant la complexité des corrélations intervenant dans cette équation est trop importante pour qu'une modélisation terme à terme puisse être envisagée [41]. C'est pourquoi la modélisation de cette équation consiste à la construire sous une forme similaire à l'équation de transport modélisée pour k. Les mécanismes de production, dissipation et diffusion de la dissipation sont alors supposés analogues à ceux de k et sont repris, multipliés par l'inverse de l'échelle moyenne de temps turbulente ε/k. Le modèle classique de Jones et Launder [41] [65] se réécrit finalement sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \overline{v_i}\dfrac{\partial(\rho k)}{\partial x_i} = \dfrac{\partial}{\partial x_i}\left[(\mu + \dfrac{\mu_t}{\sigma_k})\dfrac{\partial k}{\partial x_i}\right] + \mathcal{P}_k - \rho\varepsilon \\ \dfrac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \overline{v_i}\dfrac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial x_i} = \dfrac{\partial}{\partial x_i}\left[(\mu + \dfrac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon})\dfrac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}\right] + \dfrac{\varepsilon}{k}(C_{\varepsilon 1}\mathcal{P}_k - C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon) \\ \mathcal{P}_k = 2\mu_t \overline{S_{ij}}^2 \\ \mu_t = \rho C_\mu \dfrac{k^2}{\varepsilon} \end{cases} \tag{3.18}$$

Constantes du modèle k-ε standard

Les constantes utilisées sont obtenues à partir d'expériences numériques en incompressible.

- C_{ε_2} traduit la décroissance énergétique de la turbulence générée en aval d'une grille. En supposant une décroissance de k de la forme $k \propto x^{-m}$, la constante C_{ε_2} vérifie :

$$C_{\varepsilon_2} = \frac{m+1}{m} \tag{3.19}$$

  avec m valant $1,25 \pm 0,06$. La valeur habituellement choisie pour C_{ε_2} est de $1,92$.
- C_μ lie la contrainte de cisaillement à la paroi τ_w au montant de k dans la *zone logarithmique* d'une couche limite selon la relation :

$$C_\mu = \left(\frac{\tau_w/\rho}{k}\right)^2 = 0,09 \tag{3.20}$$

- C_{ε_1} est calculée à partir de ces deux premières constantes en écrivant le bilan de ε dans la partie logarithmique de la couche limite turbulente et en supposant l'équilibre entre la production $\mathcal{P}_k$ et la dissipation ε de l'énergie cinétique de turbulence. Le bilan de ε se réduit dans ce cas à :

$$0 = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\mu^t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\right) + (C_{\varepsilon_1} - C_{\varepsilon_2})\,\rho\frac{\varepsilon^2}{k}$$

de sorte que :

$$C_{\varepsilon_1} = C_{\varepsilon_2} - \frac{\kappa^2}{C_\mu^{1/2}\sigma_\varepsilon} \tag{3.21}$$

– $(\sigma_\phi)_{\phi=k,\varepsilon}$ sont deux constantes analogues à des nombres de Schmidt, rapport de la diffusion de la quantité de mouvement sur la diffusion de la grandeur ϕ. Elles découlent de la modélisation des termes de diffusion par une hypothèse de type gradient. Leur valeur est optimisée sur la base d'écoulements fondamentaux tels que l'écoulement de canal, de conduite, de jet et de sillage. σ_ε et σ_k admettent pour valeur :

$$\sigma_\varepsilon = 1,3 \quad \sigma_k = 1 \tag{3.22}$$

Finalement le jeu des constantes du modèle classique de Jones et Launder est donné par :

$C_\mu = 0,09$	$C_{\varepsilon 1} = 1,44$	$C_{\varepsilon 2} = 1,92$	$\sigma_k = 1,0$	$\sigma_\varepsilon = 1,3$

Le modèle $k-\varepsilon$ étendu aux écoulements à masse volumique variable

Principes Le modèle $k-\varepsilon$ est formellement développé pour des écoulements en régime incompressible mais peut être étendu au régime compressible sans modification fondamentale tant que l'amplitude des fluctuations de masse volumique est supposée rester d'un ordre de grandeur inférieur au niveau moyen de masse volumique. Afin d'établir cette nouvelle formulation, nous étendons directement la décomposition de Reynolds à la masse volumique et à la pression tandis que les autres variables sont décomposées en moyenne de Favre, soit :

$$\rho = \overline{\rho} + \rho', \;\; p = \overline{p} + p', \;\; v_i = \widetilde{v_i} + v_i'', \;\; T = \widetilde{T} + T'', \;\; \mathcal{E} = \widetilde{\mathcal{E}} + \mathcal{E}''$$

Ceci permet de dériver un système d'équations proche du système original dans le cas d'un écoulement à masse volumique variable. Nous obtenons alors le système des équations de Navier-Stokes moyennes (RANS), en situation compressible.

Reformulation du système d'équations de Navier-Stokes pour un écoulement à masse volumique variable (compressible ou dilatable)

– L'équation de continuité reste formellement identique :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{v_j}\right) = 0 \tag{3.23}$$

Le bilan de quantité de mouvement devient :

$$\frac{\partial\left(\overline{\rho}\widetilde{v_i}\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\widetilde{v_i}:\widetilde{v_j}\right) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\widetilde{\tau_{ij}} + \overline{\tau_{ij}''} - \overline{\rho v_i'' v_j''}\right] \tag{3.24}$$

Ici une nouvelle modélisation doit alors être donnée pour les tensions de Reynolds $-\overline{\rho v_i'' v_j''}$. En revanche, on néglige généralement la moyenne des fluctuations du tenseur de contraintes

visqueuses :

$$\overline{\tau''_{ij}} = \overline{\mu\left(\frac{\partial v''_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v''_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial v''_k}{\partial x_k}\right)}$$

par rapport au tenseur de contraintes visqueuses moyennes :

$$\widetilde{\tau_{ij}} = \mu\left(\frac{\partial \widetilde{v_i:}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{v_k}}{\partial x_k}\right)$$

En étendant l'hypothèse de Boussinesq pour modéliser, au premier ordre, les contraintes turbulentes de Reynolds, le problème de fermeture est ramené à celui de la détermination du coefficient de viscosité turbulente μ_t. Les contraintes s'expriment alors, dans le cadre d'écoulements à divergence non-nulle selon :

$$-\overline{\rho v''_i v''_j} = \mu_t\left(\frac{\partial \widetilde{v_i:}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\frac{\partial \widetilde{v_k}}{\partial x_k}\delta_{ij}\right) - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij} \tag{3.25}$$

L'équation moyennée de quantité de mouvement peut donc se réécrire :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\left(\overline{\rho}\tilde{v}_i\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_j + \bar{p}\delta_{ij}\right) &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu\left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \tilde{v}_\kappa}{\partial x_\kappa}\right)\right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij}\right]\end{aligned} \tag{3.26}$$

– L'énergie totale moyennée est désormais définie en prenant en compte la contribution de l'énergie cinétique, par la relation :

$$\mathcal{E} = \overline{\rho}C_v\widetilde{T} + \frac{1}{2}\overline{\rho}\tilde{v}_i\tilde{v}_i + \overline{\rho}k \tag{3.27}$$

Le bilan d'énergie totale moyenne $\mathcal{E}$ admet pour expression :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} &+ \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\tilde{v}_j\left(\mathcal{E} + p\right)\right] = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\mu\left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right)\tilde{v}_i + \lambda T_j\right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j}\left\{\left[\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3}\rho k\delta_{ij}\right]\tilde{v}_i + \lambda^t T_j + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right\}\end{aligned} \tag{3.28}$$

– Sous les hypothèses d'un nombre de Lewis égal à l'unité et d'un nombre de Prandtl supposé constant, l'équation de bilan moyen d'une espèce chimique α, admet pour expression :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\widetilde{v}_i\widetilde{Y}_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\overline{\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}} - \overline{\rho}\widetilde{v''_i Y''_\alpha}\right) + \overline{\omega}_\alpha \tag{3.29}$$

où la fermeture du terme source chimique moyen $\overline{\omega}_\alpha$ relève de la mise en oeuvre d'un modèle de combustion en écoulements turbulents (section 3.2).

Reformulation du modèle $\mathbf{k-\epsilon}$

L'équation de transport de l'énergie cinétique turbulente devient :

$$\begin{array}{ccccc} \dfrac{\partial(\overline{\rho}k)}{\partial t} & + \dfrac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{v_i}k)}{\partial x_i} & = & \overline{v_i''}\dfrac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} & \\ \underbrace{-\overline{\rho}\widetilde{v_i''v_j''}\dfrac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial x_j}}_{\mathcal{P}_k} & \underbrace{-\overline{v_i''}\dfrac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}}_{\mathcal{G}_k} & - & \underbrace{\overline{\dfrac{\partial v_i''}{\partial x_j}\sigma_{ij}''}}_{\rho\varepsilon} & +\dfrac{\partial}{\partial x_j}\underbrace{\left[\overline{v_i''\sigma_{ij}''} - \overline{\rho v_j''(\dfrac{1}{2}v_i''v_i'')} - \overline{p'v_j''}\right]}_{\mathcal{D}_k} \end{array} \tag{3.30}$$

Dans ce bilan, la corrélation du flux de masse turbulent avec le gradient des contraintes visqueuses $\overline{v_i''}\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}$ est négligée. En revanche, aux mécanismes de production $\mathcal{P}_k$, dissipation $-\rho\varepsilon$ et de diffusion $\mathcal{D}_k$, s'ajoute une nouvelle interaction notée $\mathcal{G}_k$. Liée aux effets de masse volumique variable, elle n'est donc pas *a priori* négligeable dans notre cas et nous y reviendrons par la suite. Procédant de manière analogue à celle suivie en régime incompressible, la corrélation $\overline{p'v_j''}$ n'est pas prise en compte explicitement dans le transport de l'énergie cinétique turbulente. Elle est intégrée dans les termes diffusifs, qui sont fermés par une approche du type gradient. Le terme $\mathcal{P}_k$ représente la production d'énergie cinétique de turbulence par cisaillement, interaction des contraintes de Reynolds avec les gradients de vitesse moyenne. Il est fermé en réintroduisant la fermeture étendue de Boussinesq, soit :

$$\begin{aligned} -\overline{\rho}\widetilde{v_i''v_j''}\frac{\partial \widetilde{v_i}:}{\partial x_j} &= \left[\mu_t\left(\frac{\partial \widetilde{v_j}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3}\delta_{ij}\overline{\rho}k\right]\frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial x_j} \\ &= 2\mu_t S_{ij}^* S_{ij}^* - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij} \end{aligned} \tag{3.31}$$

faisant donc intervenir en régime compressible, non plus le tenseur de déformation mais son déviateur :

$$S_{ij}^* = \left(\frac{\partial \widetilde{v_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{v_j}}{\partial x_i} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{v_k}}{\partial x_k}\right) \tag{3.32}$$

En suivant ainsi l'hypothèse de Boussinesq, ce terme représente une transformation irréversible d'énergie cinétique moyenne en énergie cinétique de turbulence.

Le terme $\mathcal{G}_k = \overline{v_i''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}$ représente l'interaction entre le flux turbulent de masse et le gradient moyen de pression. Sa modélisation précise repose sur celle du flux turbulent de masse. Suivant les travaux de Lahjaily [46], nous faisons l'hypothèse que l'enthalpie totale est constante et que les fluctuations de masse volumique sont isobares. Considérant un nombre de Mach peu élevé pour lequel la pression moyenne est quasi-constante, nous pouvons par ailleurs considérer que l'équation d'état se réexprime simplement par $\overline{\rho}\widetilde{T} = constante$. Ceci nous permet de relier les fluctuations de masse volumique aux fluctuations de température et obtenir ainsi la relation suivante :

$$\mathcal{G}_k = -\frac{1}{\overline{\rho}\widetilde{T}}\left[\overline{\rho T''v_i''}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right]$$

Dans ce terme $\mathcal{G}_k$, le flux turbulent de chaleur $\overline{\rho T'' v_i''}$ est fermé en reprenant une approche suivie par exemple par Lahjaily [46] en utilisant une fermeture du type gradient $\overline{\rho T'' v_i''} = -\frac{\mu_t}{Sc}\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i}$. Finalement le terme $\mathcal{G}_k$ se réécrit en fonction des gradients de pression et de température de la façon suivante :

$$\mathcal{G}_k = \frac{1}{\overline{\rho}\widetilde{T}}\frac{\mu_t}{Sc}\left[\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right] \tag{3.33}$$

où le nombre de Schmidt turbulent est pris égal à l'unité. L'équation de bilan fermée de l'énergie cinétique turbulente s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\left(\overline{\rho}k\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{v}_j k\right) &= \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu\frac{\partial k}{\partial x_j} + \frac{\mu^t}{\sigma_k}\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + \frac{1}{\rho^r T^r}\frac{\mu_t}{Sc}\left[\frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x}\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i}\right] - \overline{\rho}\varepsilon \\ &+ \underbrace{\left[\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial v_k}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3}\rho k\delta_{ij}\right]\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{P_k}\end{aligned} \tag{3.34}$$

L'équation de bilan pour ε n'est plus rigoureusement équivalente à son homologue en incompressible pour laquelle une équation de transport est dérivable. On peut obtenir une équation de transport exacte pour la partie isotrope du taux de dissipation ε en régime compressible, mais elle est très compliquée (elle contient 60 termes inconnus [35]). La démarche adoptée consiste généralement à décomposer, à haut nombre de Reynolds, la forme isotrope du taux de dissipation en une composante rotationnelle et une composante dilatationnelle selon (pour un écoulement turbulent homogène)

$$\overline{\rho}\varepsilon = \rho\varepsilon_s + \rho\varepsilon_c = 2\mu\overline{\omega_{ij}''\omega_{ij}''} - \frac{4}{3}\mu\overline{\frac{\partial v_k"}{\partial x_k}\frac{\partial v_k"}{\partial x_k}}$$

Le taux de dissipation solénoïdale $\rho\varepsilon_s$ représente alors le taux de dissipation dû au processus régulier de cascade énergétique inertielle aux petites échelles, observable en l'absence d'effets dilatationnels. Les études de simulation directe démontrent que l'influence de la compressibilité est généralement négligeable sur ε_s tandis que ε_c devient négligeable à bas nombre de Mach. Nous pouvons donc nous contenter de modéliser le transport de ε_s avec une démarche identique à celle précédemment retenue en régime incompressible. Nous prenons simplement en compte le mécanisme supplémentaire associé à $\mathcal{G}_k$. L'équation effectivement retenue est alors donnée par :

$$\frac{\partial\left(\rho\varepsilon\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\tilde{u}_j\varepsilon\right) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\mu\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} + \frac{\mu^t}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right) + \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon_1}P_k - C_{\varepsilon_2}\frac{\rho\varepsilon^2}{k} + \frac{\varepsilon}{k}C_{\varepsilon_3}\mathcal{G}_k \tag{3.35}$$

La résolution des expressions 3.34 et 3.35 permet ainsi de calculer le coefficient de viscosité turbulente selon :

$$\mu_t = C_\mu\frac{\rho k^2}{\varepsilon} \tag{3.36}$$

Les constantes que nous utilisons ont été ajustées par expérimentation en régime compressible. C_{ε_2} est déterminé en utilisant les données expérimentales pour une décroissance de la

turbulence isotrope, elle assure une décroissance correcte de k dans la zone inertielle. C_{ε_1} est optimisée pour un écoulement homogène cisaillé en équilibre local. Nous retenons par ailleurs la valeur donnée par Bigot [6] pour la constante $C_{\varepsilon 3}$. Les valeurs standards effectivement utilisées sont ainsi données par :

$C_\mu = 0,09$	$C_{\varepsilon 1} = 1,44$	$C_{\varepsilon 2} = 1,92$	$C_{\varepsilon 3} = 1,44$	$\sigma_k = 1,0$	$\sigma_\varepsilon = 1,3$

Remarques additionnelles Le modèle $k - \varepsilon$ ainsi constitué est donc celui que nous allons utiliser pour simuler les différents écoulements inertes et réactifs retenus, et ce même si le jeu de constantes standards utilisées n'est pas nécessairement le plus adapté à notre configuration. Ce modèle est néanmoins issu de principes assez réducteurs qui limitent sa représentativité et la précision de l'évaluation des niveaux des contraintes. Les hypothèses de l'isotropie et de l'alignement des axes principaux des déformations avec ceux des tensions semblent notamment les plus réductrices.

3.1.5 Loi de paroi

Le modèle $k-\varepsilon$ présenté jusqu'ici n'est valide que pour un nombre de Reynolds élevé et donc loin des parois. Il ne permet pas de capturer les effets visqueux qui sont prépondérants dans la zone tampon et la sous-couche laminaire. Au voisinage des parois d'ORACLES, nous utilisons alors une fonction analytique de la vitesse moyenne adimensionnée pour imposer, à une distance δ de la paroi (Fig.3.1), la contrainte de cisaillement pariétale τ_w. Il nous faut donc disposer d'une relation entre la vitesse tangentielle à cette distance δ et sa dérivée normale.

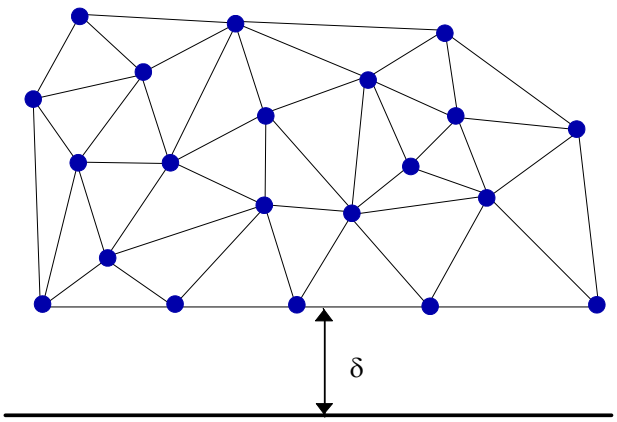

FIG. 3.1 – Distance δ entre la première maille et la frontière physique du domaine de calcul, lors de l'application d'un loi de paroi du type couche limite.

On considère un écoulement incompressible en régime permanent. En prenant en compte les approximations de couche limite [68]. On suppose que le gradient de pression longitudinal est

nul $\dfrac{\partial p}{\partial x} = 0$, que l'écoulement est localement parallèle à la paroi et que les termes de convection sont négligeables. L'équation de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial y} - \overline{\rho}\widetilde{u''v''}\right) = 0 \tag{3.37}$$

En intégrant cette relation entre la paroi et un point où ces hypothèses restent valides, on obtient pour la loi de paroi l'expression suivante :

$$\nu\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial y} - \overline{\rho}\widetilde{u''v''} = \frac{\tau_w}{\overline{\rho}} \tag{3.38}$$

On peut en déduire la contrainte de cisaillement pariétale selon :

$$\tau_w = \mu\frac{\partial \widetilde{u}}{\partial y} - \overline{\rho}\widetilde{u''v''} \tag{3.39}$$

et la vitesse de frottement selon :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\overline{\rho}}} \tag{3.40}$$

On détermine une loi pour la vitesse dans deux régions distinctes qui coexistent dans la couche limite.

- Dans la sous-couche visqueuse, les effets visqueux sont prédominants. La contrainte pariétale s'exprime alors par :

  $$\nu\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} = \frac{\tau_w}{\overline{\rho}} \tag{3.41}$$

  Si l'on suppose que les variations de la viscosité sont négligeables et si l'on se donne la condition aux limites $u(y = 0)$, l'évolution de la vitesse est linéaire et est donnée, pour $0 < y^+ < 11,6$ par :

  $$u^+ = y^+$$

  où les variables de paroi sont adimensionnées par la vitesse de frottement, soit :

  $$u^+ = \frac{\tilde{u}}{u_\tau} \ , \ y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \tag{3.42}$$

  Dans la sous-couche laminaire, la vitesse admet la variation linéaire suivante :

  $$u = \frac{\rho\ u_\tau^2\ y}{\mu} \tag{3.43}$$

- Dans la région logarithmique, la contribution visqueuse est négligée devant la contrainte turbulente :

  $$-\widetilde{u''v''} = \frac{\tau_w}{\nu} \tag{3.44}$$

  et la tension turbulente est exprimée en adoptant le modèle de longueur de mélange :

  $$-\overline{\rho}\widetilde{u''v''} = \overline{\rho} l_m^2 \left|\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y}\right| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \tag{3.45}$$

où la longueur caractéristique $l_m = \kappa \cdot y$ est proportionnelle à la distance à la paroi. Le gradient de vitesse s'exprime alors selon :

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} = \frac{1}{\kappa y}\sqrt{\frac{\tau_w}{\overline{\rho}}} \tag{3.46}$$

L'intégration de cette égalité exprimée en variables de paroi confère une évolution logarithmique à la vitesse. Cette région logarithmique s'étend dans l'intervalle $11,6 < y^+ < 300$ dans lequel la vitesse admet pour expression :

$$u = u_\tau \left[\frac{1}{\kappa}\ln\left(y^+\right) + B\right] \quad avec \;\; \kappa = 0,419 \;\; et \;\; B = 5,445 \tag{3.47}$$

- Correction bas nombre de Reynolds : La loi de paroi consiste à faire l'hypothèse que l'écoulement suit, en chaque point, une évolution logarithmique pour la vitesse comme dans le cas d'une couche limite. Elle suppose également que le nœud voisin à chaque point sur la paroi se situe aussi dans cette zone, ce qui permet de calculer aisément u_τ sur la paroi. La correction dite à bas nombre de Reynolds consiste alors à apporter les corrections nécessaires pour prendre en compte les zones de paroi où ces hypothèses ne seraient plus satisfaites. Pour ce faire, le calcul de la loi de paroi est réalisé en tenant compte de la distance y^+ des nœuds de paroi selon les expressions suivantes et dont les courbes correspondantes sont données sur la figure 3.2 :

$$\begin{array}{lcl} \dfrac{u}{u_\tau} = \dfrac{1}{\kappa}\ln\left(y^+\right) + C & \text{si} & y^+ > 25,76 \\ \dfrac{u}{u_\tau} = \dfrac{\tanh\left(C_3\; y^+\right)}{C_3} & \text{si} & y^+ \leq 25,76 \end{array}$$

- Par ailleurs, l'hypothèse d'égalité entre la production et la dissipation dans la zone de transition de la couche limite et l'équation de couche limite permettent d'estimer les niveaux d'énergie cinétique turbulente k_p et de son taux de dissipation ε_p en fonction de u_τ, soit :

$$k_p = \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)\frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}$$
$$\varepsilon_p = \left(\frac{\rho_p}{\rho}\right)^{3/2}\frac{u_\tau^3}{K\delta}$$

Ces valeurs k_p et ε_p sont alors imposées fortement aux noeuds du domaine appartenant à la frontière.

3.1.6 Modèle à bas nombre de Reynolds : Modèle de Chien

L'intérêt d'utiliser un modèle à bas nombre de Reynolds est de pouvoir calculer un écoulement confiné avec un maillage qui s'étend jusqu'aux parois solides sans avoir à utiliser de loi de paroi.

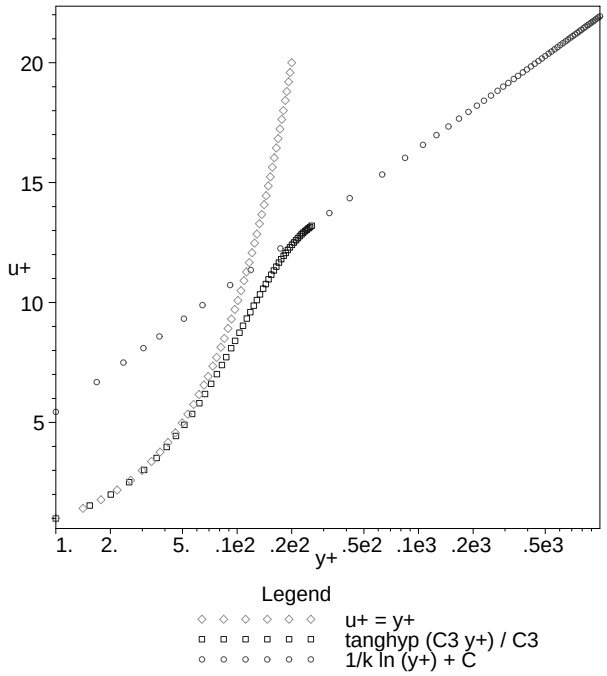

FIG. 3.2 – Raccordement entre la sous-couche visqueuse (loi linéaire $u^+ = y^+$) et la zone logarithmique ($\frac{1}{\kappa} ln(y^+) + C$) par l'intermédiaire de la relation $\frac{u}{u_\tau} = \frac{th(C_3 y^+)}{C_3}$ où $C_3 = 0,072174$.

Le modèle de Chien [17] que nous présentons ici, est un bon exemple de ce type de modèle et c'est celui que nous avons utilisé pour nos calculs d'écoulements turbulents de canal. Dans son article de référence, Chien [17] fait remarquer que le taux de dissipation du modèle $k - \varepsilon$ standard est en fait le taux de dissipation "isotrope" soit $\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_i} \frac{\partial u_i'}{\partial x_i}}$ et non le taux réel de dissipation qui s'écrit lui $D = \nu \overline{S_{ij}' S_{ij}'}$ avec $S_{ij}' = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \right)$. À grand nombre de Reynolds, les deux grandeurs sont équivalentes de par l'isotropie de la turbulence aux petites échelles. En revanche, dès que l'on se rapproche d'une paroi solide, la relaminarisation progressive de l'écoulement conduit à un taux de dissipation isotrope qui tend vers zéro alors que le taux de dissipation réel tend quant à lui vers le terme de diffusion moléculaire de l'énergie cinétique de turbulence soit $D \approx \frac{2\nu k}{y^2}$. Chien propose donc de modifier les équations du modèle $k - \varepsilon$ standard en conséquence afin de restituer un comportement satisfaisant au voisinage des parois solides. Ainsi, si l'on introduit formellement $\tilde{\varepsilon} = D - \frac{2\nu k}{y^2}$ où y est la distance du point courant à la paroi solide, alors, $\tilde{\varepsilon}$ est tel qu'il s'annule sur toute paroi solide. Les équations proposées par Chien s'écrivent alors dans un repère cartésien (O, x, y) :

f_1	f_2	f_μ	c_μ	C_{ε_1}	C_{ε_2}	σ_k	σ_ε
$1,0$	$1,0-0,22e^{-(\frac{R_t}{6})^2}$	$1-e^{-0,0115y^+}$	$0,09$	$1,35$	$1,80$	$1,0$	$1,30$

TAB. 3.1 – Expression des fonctions et valeurs des constantes relatives au modèle de Chien.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\bar{\rho}k}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\tilde{u}k-(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(\bar{\rho}\tilde{v}k-(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial y}) &= P_k-\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}-2\mu\frac{k}{y^2}\\
\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\varepsilon}-(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon})\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{\varepsilon}-(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon})\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial y}) &= C_{\varepsilon_1}f_1\frac{\tilde{\varepsilon}}{k}P_k-C_{\varepsilon_2}f_2\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k}\\
&\quad -2\mu\frac{\tilde{\varepsilon}}{y^2}e^{-0.5y^+}
\end{aligned}$$

avec μ_t qui est obtenu par :

$$\mu_t=c_\mu f_\mu\bar{\rho}\frac{k^2}{\tilde{\varepsilon}}$$

où y^+ est défini par $y^+=\bar{\rho}y\frac{u_\tau}{\mu}$, expression dans laquelle la vitesse de frottement est classiquement définie par $u_\tau=\sqrt{\frac{\mu}{\bar{\rho}}(\frac{\partial u_{//}}{\partial n})_{paroi}}$ où $u_{//}$ désigne la composante tangentielle à la paroi du vecteur de vitesse moyenne et où n représente la direction normale à la paroi. Les diverses constantes et fonctions correctrices présentes dans les expressions précédentes, caractéristiques de ce modèle, sont regroupées dans le tableau 3.1 où le nombre de Reynolds turbulent R_t est défini par $R_t=\frac{\bar{\rho}k^2}{\mu\tilde{\varepsilon}}$.

3.2 Pour la combustion

3.2.1 Taux de réaction chimique moyen

Le terme source chimique moyen $\overline{w}$, qui apparaît dans les équations de l'aérotermochimie dans le cadre de notre description statistique des écoulements turbulents réactifs doit être calculé en ayant recours à un modèle de combustion en écoulements turbulents. Dans cette section, nous nous proposons de décrire le modèle CLE (Combustion Limitée par l'Équilibre de Tourniaire [75] et Ravet et al. [63]) que nous avons utilisé pour la fermeture de ce terme source lors de nos simulations en écoulements réactifs. Ce modèle est inspiré du modèle CRAMER, mis au point à l'ONERA. Avant de décrire en détail le modèle CLE, nous rappelons la problématique de la combustion turbulente afin de préciser le cadre dans lequel ce modèle s'inscrit.

3.2.2 Les régimes de combustion

Dans le domaine de la combustion, on distingue classiquement deux types de flammes : les flammes de diffusion et les flammes de prémélange. Les phénomènes physiques régissant ces deux

types de combustion étant fondamentalement différents, on distingue deux régimes d'application des modèles de combustion turbulente qui sont développés spécifiquement en fonction du type de flamme à prévoir numériquement : la combustion prémélangée et la combustion non-premelangée. Afin de mieux comprendre les interactions entre la turbulence et la combustion en régime de combustion prémélangée, Damköhler proposa en 1940 une classification des régimes de combustion turbulente en se basant sur une étude comparative des échelles caractéristiques de ces phénomènes. Des travaux basés sur le même approche phénoménologique (Borghi [8], Peters [57], Poinsot [61]) ont conduit à l'élaboration d'un diagramme détaillant la structure des flammes turbulentes prémélangées qui nous intéressent plus particulièrement. La turbulence est caractérisée par le recours à deux échelles spatiale de fluctuations de vitesse qui sont l'échelle intégrale Λ et l'échelle de Kolomogorov η auxquelles sont associées les échelles des fluctuations rms de vitesse u'_Λ et u'_η. Le nombre de Reynolds turbulent Re_Λ défini par $Re_\Lambda = \frac{\Lambda\ u'_\Lambda}{\nu}$ est tel que la valeur $Re_\Lambda \approx 1$ permet de discriminer entre un écoulement laminaire ($Re_\Lambda < 1$) et un écoulement turbulent ($Re_\Lambda > 1$). De par sa définition, l'échelle de Kolmogorov est telle que $Re_\eta = \frac{\eta\ u'_\eta}{\nu} \approx 1$. À partir de ces échelles d'espace et de vitesse, on peut alors définir deux temps caractéristiques de la turbulence qui sont $\tau_\Lambda = \frac{\Lambda}{u'_\Lambda}$ et $\tau_\eta = \frac{\eta}{u'_\eta}$. La combustion en régime prémélangé est caractérisée quant à elle par le temps de transit τ_f à travers une flamme de prémélange défini comme étant le rapport de l'épaisseur δ_l d'une flamme plane non étirée sur sa vitesse de propagation S_l, soit $\tau_f = \frac{\delta_l}{S_l}$. La comparaison des deux temps de turbulence avec le temps de transit à travers le front permet alors de définir d'une part le nombre de Damköhler $Da = \frac{\tau_t}{\tau_f}$ et d'autre part le nombre de Karlovitz $Ka = \frac{\tau_f}{\tau_k} \approx \frac{{\delta_l}^2}{{l_k}^2}$. Représentées dans un plan $(\frac{u'_\Lambda}{S_l}, \frac{\Lambda}{S_l})$ en échelle log-log, les courbes d'isovaleur de Re_Λ, Da et Ka permettent de mettre en évidence, selon les valeurs respectives de ces trois nombres les différents régimes limites. Ceux-ci vont i) du régime de réacteur parfaitement agité ($Re_\Lambda > 1$, $Ka > 1$, $Da < 1$ et $\frac{u'_\Lambda}{S_l} > 1$) au régime de ii) fronts minces avec dynamique ($Re_\Lambda > 1$, $Ka < 1$, $Da > 1$ et $\frac{u'_\Lambda}{S_l} < 1$) où la propagation du front de flamme par rapport aux gaz frais qu'il consomme est si rapide qu'elle empêche le repliement du front sur lui-même lors de son interaction avec les structures turbulentes, la zone de réaction pouvant alors être assimilée à un front laminaire simplement déformé par la turbulence, en passant par le régime de iii) front mince sans dynamique ($Re_\Lambda > 1$, $Ka < 1$, $Da > 1$ et $\frac{u'_\Lambda}{S_l} > 1$) dit régime de "flammelette" où la vitesse de propagation du front de flamme n'est pas assez importante pour empêcher l'interaction de deux parties du front enroulé sur lui-même par les structures turbulentes, ce qui peut donner naissance à des poches de gaz frais au sein des gaz brûles et vice-versa et enfin le régime de iv) flamme plissée-épaissie ($Re_\Lambda > 1$, $Ka > 1$, $Da > 1$ et $\frac{u'_\Lambda}{S_l} > 1$). En appliquant les critères décrits précédemment, Nguyen [54] a calculé les valeurs correspondant aux nombres de $Re_{\Lambda,}$ Ka et Da (tableau 3.2) et a pu ainsi positionner, dans le diagramme des régimes de combustion, les écoulement réactifs c_1, c_2 et c_3 étudiés dans notre travail. Il apparaît que les conditions de fonctionnement pour ces écoulements se caractérisent

par un régime de combustion qui se trouve à la limite entre le régime de flamme plissée-épaissie et celui de front mince sans dynamique, ce que l'on supposera raisonnablement être également le cas pour les écoulements h_1 et m_1. Ces constatations nous permettent de légitimer le choix que nous avons fait, d'un modèle de type flammelette à richesse variable, le modèle de Chimie Limitée par l'Équilibre ou modèle CLE que nous allons maintenant présenter.

Cas	Canal	Φ	S_l (cm/s)	τ_f (ms)	u'_s (m/s)	Λ (mm)	Re_Λ	Da	Ka
c_1	haut	$0,75$	$22,5$	$2,8$	$0,779$	$24,3$	1440	$11,1$	$3,4$
	bas	$0,75$	$22,5$	$2,8$	$0,667$	$19,8$	1020	$10,6$	$3,0$
c_2	haut	$0,70$	$17,1$	$4,7$	$1,041$	$29,8$	2360	$6,0$	$8,1$
	bas	$0,80$	$27,2$	$2,0$	$0,931$	$28,0$	2010	$15,2$	$2,9$
c_3	haut	$0,65$	$10,9$	$11,3$	$0,612$	$17,8$	830	$3,0$	$11,2$
	bas	$0,85$	$31,1$	$1,5$	$0,597$	$16,3$	760	$17,7$	$1,54$

TAB. 3.2 – Paramètres principaux permettant de caractériser le régime de combustion en écoulements turbulents pour les écoulements c_1 c_2 et c_3.

3.2.3 Le modèle CLE

Le développement du modèle de Chimie Limitée par l'Équilibre a été motivé principalement par la nécessité de modéliser les phénomènes physiques ayant lieu dans les systèmes industriels où, de par la complexité des écoulements, la flamme conserve rarement une nature identique dans tout l'ensemble du dispositif. Pour ce type de situation où les deux types de combustion (prémélange ou diffusion) peuvent coexister (prémélange ou diffusion), ce modèle présente l'avantage de pouvoir être appliqué, *a priori*, indifféremment quelque soit le type de combustion qui se déroule au sein de l'écoulement considéré.

Le modèle CLE, classé dans les modèles à PDF présumée, utilise une PDF de type Bêta. Il est basé sur l'hypothèse classique de chimie rapide associée à une réaction chimique globale de la forme[6] :

$$\mathbf{F}uel + s \ \ (\mathbf{O}xydant + b \ \ \mathbf{D}iluant) \longrightarrow (1+s)\mathbf{P}roduits + sb \ \ \mathbf{D}iluant \tag{3.48}$$

où s et b sont des coefficients stœchiometriques massiques.

Si l'on considère la variable $Z_f = \frac{Y_f+1}{(1+s)}Y_p$ définie en fonction des fractions massiques de combustible Y_f et de produit Y_p, on peut obtenir une équation d'evolution pour Z en sommant les équations d'evolution de Y_f et Y_p, soit :

[6] La réaction chimique à une seule étape pour un mélange air-C_3H_8 est présentée dans l'annexe B.

$$\frac{\partial \rho Z_f}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i Z_f}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_l}{\sigma_f}\frac{\partial Z_f}{\partial x_i}\right) \tag{3.49}$$

On parle donc d'un scalaire passif vis à vis du processus de combustion. La connaissance de Z_f et de la fraction massique d'une espèce réactive, par exemple celle du combustible, nous permet de déduire les autres fractions massiques inconnues par les relations suivantes (Ravet et al. [63]) :

$$\begin{cases} Y_o = \dfrac{1-Z_f}{1+b} - s(Z_f - Y_f) \\ Y_p = (1+s)(Z_f - Y_f) \\ Y_d = \dfrac{d}{1+d}(1-Z_f) \end{cases} \tag{3.50}$$

L'évolution de Y_f et Z_f est régie par le couplage par le champ de vitesse de leurs équations de bilan avec les équations de Navier-Stokes. Dans le cas où le nombre de Schmidt est égal pour toutes les espèces participant au mélange, l'équation pour Z_f est une équation homogène tandis que celle pour Y_f fait intervenir le terme de production chimique moyen $\overline{\omega}$ qui représente le terme de consommation du fuel (cf. l'expression 3.57) qui s'écrit :

$$\overline{\omega} = \int\int \omega(Y_f, Z_f)\mathcal{P}(Y_f, Z_f)dY_f\ dZ_f$$

Calcul de $\overline{\omega}$

La nature de l'évolution conjointe des variables Y_f et Z_f peut être appréhendée dans l'espace des phases pour les deux types de combustion "limites" que sont le régime de diffusion pur et le régime de prémélange parfait. Dans le premier cas, on suppose que l'oxydant est injecté par l'entrée A et le combustible par l'entrée B. En régime de prémélange parfait, on suppose que l'on injecte ce prémélange de richesse donnée au niveau de la seule entrée A. En régime de diffusion, compte-tenu de l'hypothèse de chimie rapide, les positions possibles décrivant l'état thermochimiques des particules fluides dans le plan de phase se regroupent soit sur la droite de mélange AB soit sur la courbe d'équilibre chimique $Y_{f_{eq}}(Z_f)$ (voir figure 3.3). En situation de prémélange parfait, elles se limitent au point d'entrée A et au point C qui lui correspond sur la courbe d'équilibre pour la même valeur de la fraction de mélange.

Sur chaque portion admissible de l'espace de phases, un terme source instantané est calculé en écrivant une équation d'évolution (sous forme lagrangienne), pour la fraction massique de fuel instantanée, pour laquelle on modélise le terme de diffusion à l'aide du modèle IEM (interaction par échange avec la moyenne, voir à ce sujet l'ouvrage très complet de Fox [32]). On a alors :

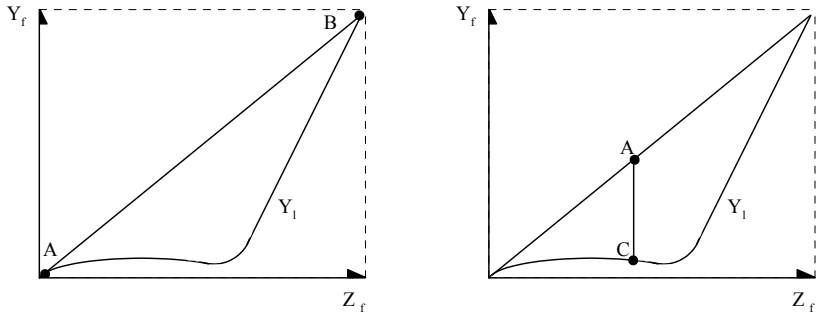

FIG. 3.3 – Trajectoire des particules fluides dans le plan de phase : régime de diffusion pur (à gauche) et régime de prémélange parfait (à droite).

$$\frac{dY_f}{dt} = \frac{\tilde{Y}_f - Y_f}{\tau} + \omega$$

L'hypothèse de chimie infiniment rapide qui nous a amené à ne considérer que deux trajectoires possibles dans cet espace des phases, entraîne que :

- $\omega = 0$ sur la trajectoire où la particule fluide se mélange sans brûler ($Y_f = Z_f$, segment AB).
- $\omega = -\frac{\tilde{Y}_f - Y_f}{\tau}$ sur la trajectoire d'équilibre ($Y_f = Y_{f_{éq}}(Z_f)$) sur laquelle la particule atteint instantanément son état final pour lequel $\frac{dY_f}{dt} = 0$ où τ est le temps caractéristique de diffusion des espèces. Ceci correspond alors à un équilibre entre la réaction chimique et la diffusion des espèces.

L'étape suivante consiste à moyenner les expressions précédentes. On écrit successivement :

$$\overline{\omega} = \int\int \omega(Y_f, Z_f)\mathcal{P}(Y_f, Z_f)dY_f dZ_f$$

soit encore :

$$\overline{\omega} = \int_{Z_f} \left(\int_{Y_f} \omega(Y_f, Z_f)\mathcal{P}(Y_f/Z_f)dY_f \right) \mathcal{P}(Z_f)dZ_f$$

L'hypothèse de chimie rapide induit une représentation bimodale de la PDF conditionnée $\mathcal{P}(Y_f/Z_f)$, soit

$$\mathcal{P}(Y_f/Z_f) = \alpha\delta(Y_f - Y_{f_{éq}}(Z_f)) + (1-\alpha)\delta(Y_f - Z_f)$$

où α est la probabilité que la particule fluide de fraction de mélange Z_f soit constituée de gaz brûlés à l'équilibre. L'introduction de cette expression dans celle du taux de réaction moyen conduit à :

$$\overline{\omega} = \int_{courbe\ d'équilibre} \alpha\omega(Y_f = Y_{f_{éq}}(Z_f), Z_f)\mathcal{P}(Z_f)dZ_f + \int_{droite\ de\ mélange} (1-\alpha)\omega(Y_f = Z_f, Z_f)\mathcal{P}(Z_f)dZ_f$$

Puisque le taux de réaction est nul sur la droite de mélange, le second terme du membre de droite de l'expression ci-dessus est nul. Si l'on suppose que α est indépendant de la valeur instantanée de Z, il vient alors :

$$\overline{\omega} = -\alpha \int_{courbe\ d'équilibre} \frac{\tilde{Y}_f - Y_{f_{éq}}(Z_f)}{\tau} \mathcal{P}(Z_f) dZ_f$$

α est ainsi déterminé en explicitant $\tilde{Y}_f$, soit :

$$\tilde{Y}_f = \alpha \int_{courbe\ d'équilibre} Y_{f_{éq}}(Z_f)\mathcal{P}(Z_f)dZ_f + (1-\alpha)\int_{droite\ de\ mélange} Z_f\mathcal{P}(Z_f)dZ_f$$

ce qui conduit à $\alpha = \frac{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_f}{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_{f_{éq}}}$ avec :

$$\tilde{Y}_{f_{éq}} = \int_{courbe\ d'équilibre} Y_{f_{éq}}(Z_f)\mathcal{P}(Z_f)dZ_f$$

La formulation finale du taux de réaction moyen s'exprime alors comme :

$$\overline{\omega} = -\frac{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_f}{\tau}\frac{\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_{f_{éq}}}{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_{f_{éq}}} \tag{3.51}$$

La détermination complète de $\overline{\omega}$, nécessite la connaissance des valeurs moyennes de $\tilde{Z}_f$ et $\tilde{Y}_f$ qui sont issues de la résolution des équations de bilan décrites précédemment, ainsi que la détermination de la fonction densité de probabilité $\mathcal{P}(Z_f)$. Dans notre cas, cette PDF est supposée être une fonction de type Bêta, soit :

$$\mathcal{P}(Z_f) = \frac{Z_f^{\alpha-1}(1-Z_f)^{\beta-1}}{\int_0^1 Z_f^{\alpha-1}(1-Z_f)^{\beta-1}dZ_f}$$

où les valeurs de α et β sont calculées à partir des valeurs de $\tilde{Z}_f$ et $\widetilde{Z_f''^2}$ suivant :

$$\alpha = \tilde{Z}_f\left(\frac{\tilde{Z}_f(1-\tilde{Z}_f)}{\widetilde{Z_f''^2}} - 1\right) \quad et \quad \beta = (1-\tilde{Z}_f)\left(\frac{\tilde{Z}_f(1-\tilde{Z}_f)}{\widetilde{Z_f''^2}} - 1\right)$$

L'équation pour la variance de $\tilde{Z}$ qui doit alors être également résolue, s'écrit (Poinsot et Veynante [60]) :

$$\frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{Z_f''^2}}{\partial t} + \frac{\partial\overline{\rho}\tilde{v}_i\widetilde{Z_f''^2}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{Sc_{t_1}}\frac{\partial\widetilde{Z_f''^2}}{\partial x_i}\right) - c\overline{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{Z_f''^2} + 2\frac{\mu_t}{Sc_{t_2}}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_i}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_i}$$

où la constante c est choisie telle que $c = 2$, et les deux nombres de Schmidt turbulents Sc_{t_1} et Sc_{t_2} sont choisis identiques et égaux à $0,8$. Le temps caractéristique τ "d'échange" avec la moyenne, est classiquement relié au temps caractéristique $\frac{k}{\varepsilon}$ de la turbulence par la relation :

$$\frac{1}{\tau} = C_{CLE}\frac{\varepsilon}{k}$$

où C_{CLE} est une constante du modèle.

Le modèle CLE prend en compte les seuils minimum et maximum d'inflammabilité du mélange et représentés sur la figure 3.4 qui présente (en rouge) les trajectoires dans le plan de phase admissibles par le modèle. La traduction de la prise en compte de ces limites d'inflammabilité conduit aux relations suivantes :

$$\begin{cases} Y_{f_{éq}} = Z_f \ si \ Z_f \in [0, Z_{f1}] \cup [Z_{f2}, 1] \\ Y_{f_{éq}} = Y_{f_{éq}}(Z_f) \ si \ Z_f \in [Z_{f1}, Z_{f2}] \end{cases} \tag{3.52}$$

où Z_{f_1} correspond à la richesse d'extinction pauvre (points A' et C) et Z_{f2} correspond à celle d'extinction riche (points B' et E). Sur ORACLES, la richesse d'extinction pauvre est de l'ordre de $0,55$, ce qui fait que la plage de variation de Z sera toujours strictement incluse dans l'intervalle $[Z_{f1}, Z_{fs}]$ qui correspond aux segments (A_1, A_1') et (A_2, A_2') et il n'y aura donc pas d'incidence de ces mécanismes d'extinction.

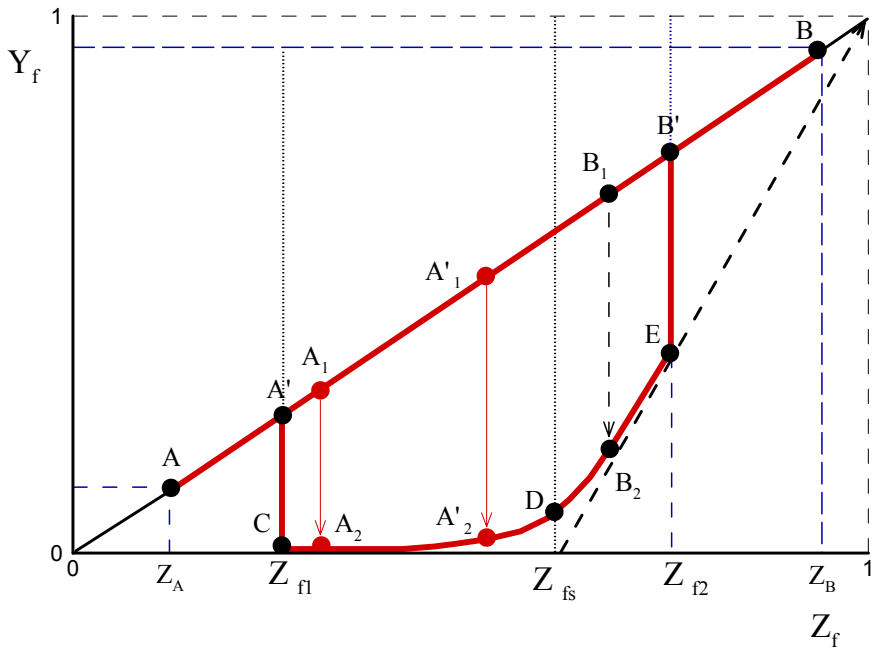

FIG. 3.4 – Trajectoires possibles et associées au modèle de combustion retenu et tracées dans le plan de phase.

Le calcul de $Y_{f_{éq}}(Z_f)$

La réduction du schéma cinétique à une seule étape (i.e. l'expression 3.48), exclut la prise en compte des phénomènes de dissociation et la création d'espèces intermédiaires au voisinage de la

stœchiométrie. Ceci entraîne des niveaux de température de fin de combustion trop élevés. Pour pallier ce défaut, la fonction $Y_{f_{éq}}(Z_f)$ sera calculée de façon à prendre en compte la présence d'espèces multiples produites par un schéma réactionnel complexe. On considère pour cela un mélange de combustible et d'air aux températures initiales respectivement données par T_{air} et T_{fuel}. Si on note $T_{éq}$ la température finale des produits de la combustion isobare de ce mélange la conservation de l'enthalpie impose alors :

$$h_{gf}(T_{air}, T_{fuel}) = h_{gb}(T_{éq})$$

où gf=gaz frais et gb=gaz brûlés. En exprimant cette égalité en fonction des enthalpies de chaque constituant, il vient :

$$Y_o h_o(T_{air}) + Y_d h_d(T_{air}) + Y_f h_f(T_f) = Y_o h_o(T_{éq}) + Y_d h_d(T_{éq}) + Y_p h_p(T_{éq}) + Y_f h_f(T_{éq}) \quad (3.53)$$

Si l'on remarque (Tourniaire [75]) qu'avant la combustion $Y_f = Z$ et que les fractions massiques d'oxydant et diluant s'expriment en fonction de celle de Y_f et de Z_f, on peut avoir la relation suivante :

$$Y_{f_{éq}} = Y_{f_{éq}}(Z_f, T_{air}, T_{fuel}) \quad (3.54)$$

pour T_{air} et T_{fuel} fixées.

Soit h l'enthalpie du système réduit à Y_f, Y_o, Y_p et Y_d, en supposant la réaction isenthalpique (voir la relation(3.53), on a la relation suivante :

$$h_{initiale} = h_{finale} = \sum_{i=1}^{4} \int_{T_o}^{T_f} Y_i Cp_i(T)dt + Y_i h_i^0$$

où T_o est la température de référence à laquelle les enthalphies de formation sont évaluées (dans notre cas, cette temperature est égale à 300 K). Les relations entre les espèces définies par les relations (3.50) restent valables à l'équilibre, soit :

$$\begin{cases} Y_{o_{éq}} = \frac{1-Z_{f_{éq}}}{1+b} - s(Z_{f_{éq}} - Y_{f_{éq}}) \\ Y_{p_{éq}} = (1+s)(Z_{f_{éq}} - Y_{f_{éq}}) \\ Y_{d_{éq}} = \frac{d}{1+d}(1 - Z_{f_{éq}}) \end{cases} \quad (3.55)$$

Le calcul à l'équilibre de la température de fin de combustion est réalisé en utilisant la méthode de l'élément potentiel[7]. Dans cette méthode, la recherche des éléments potentiels est réalisée, en minimisant la fonction de Gibbs des espèces dominantes. Dans le cas du programme N3SNatur, cette fonction est ensuite tabulée puis est stockée afin d'obtenir les valeurs de $\tilde{Y}_{f_{éq}}$ dès que celles de $\tilde{Z}_f$ et $\widetilde{Z_f''^2}$ sont connues. Le calcul à l'équilibre a été réalisé en utilisant le schéma

[7]La méthode de l'élément potentiel a été développé et implantéé par W.C. Reynolds en 1995 [64] dans la subroutine de calcul STANJAN acronyme de STANFORD et JANAF (les tables des propriétés thermodynamiques du NIST [15]), STANJAN est utilisé pour la subroutine EQUIL dans les librairies du code CHEMKIN.

réactionnel *"GRI-mech Version 3.0 7/30/99"* à 5 éléments, 53 espèces, et 325 réactions simuler la combustion d'un mélange réactif air-propane de température initiale égale à 300 K et à une pression de un bar. Le résultat de ce calcul dans l'espace des phases est illustré ci-après sur la figure 3.5 où l'on observe que la température obtenue pour un mélange en proportion stœchiométrique est de 2298 K.

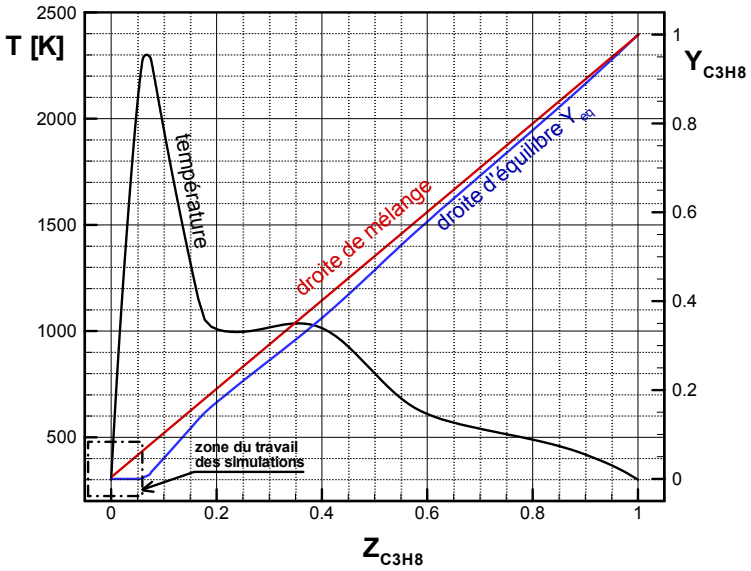

FIG. 3.5 – Évolutions de la température et de la fraction massique de propane obtenues à partir du calcul des propriétés de l'équilibre chimique d'un mélange propane-air à 300K et une pression de 1 bar.

3.2.4 Quelques éléments relatifs aux propriétés de propagation de base connues *a priori* pour les zones de réaction moyennes à richesse constante associées au modèle retenu

Le terme de production chimique moyen du modèle CLE présenté ci-dessus est directement fonction d'une constante dont le manque d'universalité représente évidemment l'une des faiblesses intrinsèques de ce modèle. La tentation est donc grande et somme toute inévitable de vouloir adapter la valeur de cette constante de manière à reproduire au mieux la réalité de l'écoulement réactif simulé. Il est néanmoins possible de modifier cette constante en connaissance de cause, et non en aveugle, en essayant de comprendre *a priori* quel peut-être l'impact d'une telle modification en essayant de répondre simplement à la question suivante : est-t'il possible d'associer une vitesse de flamme turbulente aux zones de réaction moyennes, calculées sur la base du présent modèle ? Si tel est le cas, dans quelle mesure cette vitesse est-elle reliée à la valeur du coefficient C_{CLE} ? Ce point est à nos yeux très important, puisque la vitesse de flamme turbu-

lente est l'une des grandeurs fondamentales qui contrôle les caractéristiques de la stabilisation de la zone de combustion moyenne au sein de l'écoulement modélisé. Notons ainsi que Frolov et al. [34] par exemple, utilisent explicitement cette vitesse de flamme turbulente pour "fermer" leur modèle de combustion à PDF présumée qu'ils appliquent ensuite à l'étude numérique de la stabilisation d'un sillage réactif turbulent. Signalons également le travail de synthèse impressionnant de Lipatnikov et Chomiak [51] qui mettent en évidence les différents aspects associés au concept même de vitesse de flamme turbulente et qui examinent en particulier les conditions d'apparition d'un régime de propagation de type self-similaire dont ils mettent en évidence le côté assez universel.

Nous allons considérer ici la géométrie d'une flamme plane turbulente adiabatique monodimensionnelle se propageant au sein d'un prémélange air-fuel de richesse uniforme Φ^0et qui serait calculée sur la base du modèle CLE présenté précédemment. Dans cette situation, il est facile de voir que le modèle CLE retenu se réduit à un modèle de type Eddy-Break-Up (EBU). En effet, si nous introduisons la variable d'avancement c définie par :

$$c = \frac{Y_f^0 - Y_f}{Y_f^0 - Y_{f_{éq}}^0} \equiv \frac{T - T_f^0}{T_{b_{éq}}^0 - T_f^0} \tag{3.56}$$

où Y_f^0 et T_f^0 désignent la fraction massique de fuel et la température correspondant au mélange air-fuel de richesse Φ^0et $T_{b_{eq}}^0$ correspond la température au sein des gaz brûlés à l'équilibre. Il est immédiat de déduire que cette variable c varie entre 0 dans le prémélange réactif et 1 dans les gaz brûlés à l'équilibre. L'équation de bilan moyenne pour $\tilde{c}$ se déduit alors immédiatement de celle pour $\tilde{Y}_f$ en introduisant dans l'équation de bilan de cette dernière grandeur le changement de variable 3.56. Considérons en effet l'équation pour $\tilde{Y}_f$ en 1D, soit :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{Y}_f}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Y}_f}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_f}{\partial x}\right) = \overline{\omega} \tag{3.57}$$

avec, en reprenant les notations précédentes $\overline{\omega}_{CLE} = -C_{CLE}\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}(\frac{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_f}{\tilde{Z}_f - \tilde{Y}_{f_{éq}}})(\tilde{Y}_f - \tilde{Y}_{f_{éq}})$.

En remarquant que, à richesse uniforme, la fonction densité de probabilité de la fraction de mélange Z_f est un pic de Dirac sur $Z_f^0 = Y_f^0$, on a alors $\tilde{Z}_f = Y_f^0$ et $\tilde{Y}_{f_{éq}} = Y_{f_{éq}}^0$ et donc $\overline{\omega}_{CLE}$ s'écrit alors $\overline{\omega}_{CLE} = C_{CLE}\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}(\frac{Y_f^0 - \tilde{Y}_f}{Y_f^0 - Y_{éq}^0})(\tilde{Y}_f - Y_{éq}^0)$. En introduisant la définition 3.56 dans l'équation 3.57, l'équation de bilan pour $\tilde{c}$, qui s'obtient aisément après une manipulation élémentaire et en ayant recours en particulier à l'équation de continuité, s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{\rho}\, D_t \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}\right) = C_{CLE}\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\tilde{c}(1 - \tilde{c}) \tag{3.58}$$

Pour ce type d'équation, les travaux de Corvellec [22] et Corvellec et al. [24] entre autres, ont montré que l'analyse de Kolmogorov et al. [45] dite KPP et développée initialement pour

les écoulements à masse volumique constante pouvait également s'appliquer pour un écoulement à masse volumique et coefficient de transport turbulent variables dans le cas où le transport turbulent du scalaire est modélisé par une fermeture de type gradient. Le lecteur intéressé par les développements mathématiques récents associés en particulier aux caractéristiques des opérateurs différentiels concernés par la propagation de ce type d'ondes de réaction-diffusion pourra utilement se reporter au travail de Ducrot [27]. En suivant l'approche suggérée par Corvellec [22], nous allons maintenant rappeler ici les principaux éléments de cette analyse, telle qu'on peut l'appliquer à la propagation d'une flamme plane turbulente 1D au sein d'un prémélange réactif, modélisée par une approche de type EBU.

Les équations de bilan pour une flamme plane 1D

Dans le cas où l'on recherche une solution correspondant à la propagation d'une flamme à la vitesse constante S_t dans laquelle les profils ne se déforment plus au cours du temps, cette solution peut être recherchée comme une solution stationnaire du problème réécrit dans un repère mobile qui se déplace à cette vitesse de flamme S_t, ce qui donne, à partir de l'équation 3.58 d'évolution de $\tilde{c}$:

$$\frac{d\overline{\rho}\tilde{c}(\tilde{u}+S_t)}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\overline{\rho}\, D_t \frac{d\tilde{c}}{dx}\right) = C_{CLE}\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{3.59}$$

Cette équation doit bien sûr être complétée par l'équation de continuité et l'équation de quantité de mouvement suivantes :

$$\frac{d\overline{\rho}(\tilde{u}+S_t)}{dx} = 0 \tag{3.60a}$$

$$\frac{d\overline{\rho}\tilde{u}(\tilde{u}+S_t)}{dx} + \frac{d\overline{p}}{dx} + \frac{2}{3}\frac{d\overline{\rho}k}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\frac{4}{3}\mu_t\frac{d\tilde{u}}{dx}\right) = 0 \tag{3.61a}$$

ainsi que par l'équation d'état à Mach zéro $\overline{\rho}\tilde{T} = cste$, qui peut s'écrire également $\overline{\rho} = \frac{\rho_f}{1+\chi\tilde{c}}$ $= cste$, avec le facteur d'expansion thermique χ défini par $\chi = \frac{T^0_{b_{éq}} - T^0_f}{T^0_f}$ et par les équations associées au modèle de turbulence permettant de calculer en particulier k, l'échelle de temps $\frac{k}{\varepsilon}$ et les coefficents de transport D_t et μ_t. Comme le fait remarquer Corvellec [22], dans le cas particulier où D_t et $\overline{\omega}$ sont considérées comme des fonctions de $\tilde{c}$ et où l'on considère que dans l'équation de quantité de mouvement, le terme $\frac{d\overline{\rho}k}{dx}$reste de l'ordre de $k_f\ \frac{d\overline{\rho}}{dx}$, les équations (3.60a) et (3.59) deviennent découplées de l'équation (3.61a) et peuvent être résolues indépendamment de cette dernière. L'équation de quantité de mouvement (3.61a) permet, une fois ces équations résolues, de déterminer *a posteriori* l'évolution spatiale de la pression $\overline{p}$. Sans perte de généralité, nous supposerons que le prémélange réactif est au repos en moyenne dans le repère du laboratoire, ce qui permet d'en déduire que si le front moyen de réaction se déplace au sein de ce prémélange à la vitesse S_t, le flux de masse converti en moyenne à travers ce front est alors égal à $m = \rho_f S_t$. Nous supposerons de plus que l'échelle de temps $\frac{k}{\varepsilon}$ est une constante dans tout le domaine 1D

considéré soit $\frac{k}{\varepsilon} = \frac{k_f}{\varepsilon_f}$, échelle de temps caractéristique de la turbulence dans le prémélange réactif. Cette hypothèse nous permettra d'utiliser une technique classique dans l'analyse des équations de type réaction-diffusion. Sous ces hypothèses, l'équation sur laquelle nous allons désormais travailler s'écrit donc :

$$m\frac{d\tilde{c}}{dx} - \frac{d}{dx}\left(\overline{\rho}D_t\frac{d\tilde{c}}{dx}\right) = C_{CLE}\frac{\varepsilon_f}{k_f}\overline{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{3.62}$$

Équation de la variable d'avancement dans le plan de phase $(P(\tilde{c}), \tilde{c})$

Nous retenons ici le changement de variable proposé par Corvellec [22] dans le cas d'un transport turbulent pouvant éventuellement se faire à contre-gradient, mais nous considérerons dans notre cas, que le transport turbulent est uniquement de type gradient avec un coefficient de transport associé strictement positif, continu et dérivable à dérivée bornée en fonction de $\tilde{c}$. Nous noterons alors $D_{t_o} = \lim_{\tilde{c}\to 0} D_t = D_t(\tilde{c}=0)$ et $D_{t_1} = \lim_{\tilde{c}\to 1} D_t = D_t(\tilde{c}=1)$. Nous introduisons la variable P, nulle en $\tilde{c}=0$ et en $\tilde{c}=1$, définie par :

$$P = \frac{\overline{\rho}D_t}{m}\frac{d\tilde{c}}{dx} \tag{3.63}$$

avec

$$\frac{dP}{dx} = \frac{dP}{d\tilde{c}}\frac{d\tilde{c}}{dx} = \frac{m}{\overline{\rho}D_t}P\frac{dP}{d\tilde{c}} \tag{3.64}$$

L'équation de la variable d'avancement 3.58, écrite dans l'espace des phases, devient alors :

$$P\frac{dP}{d\tilde{c}} = P - \frac{\overline{\rho}D_t}{m^2}\overline{\omega} \tag{3.65}$$

avec $\overline{\omega} = C_{CLE}\frac{\varepsilon_f}{k_f}\overline{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})$. En utilisant l'expression de $\overline{\omega}$ ainsi que l'équation d'état, cette équation peut se mettre sous la forme suivante :

$$P\frac{dP}{d\tilde{c}} = P - \frac{1}{\Lambda^2}\frac{D_t}{D_{t_o}}\frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{(1+\chi\tilde{c})^2} \tag{3.66}$$

avec :

$$\Lambda = \frac{m}{\rho_f}\left(\frac{k_f}{C_{CLE}\ \varepsilon_f\ D_{t_o}}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{S_t}{S_{réf}} \tag{3.67}$$

et $S_{réf}$ définie par $S_{réf} = \left(\frac{C_{CLE}\ \varepsilon_f\ D_{t_o}}{k_f}\right)^{\frac{1}{2}}$.

Comme nous allons le voir maintenant, l'existence et la détermination de S_t passent, classiquement, par l'étude des courbes intégrales de l'équation 3.66 et plus particulièrement de leur comportement au niveau des points singuliers $\tilde{c}=0$ et $\tilde{c}=1$.

Étude des solutions au voisinage des gaz frais et des gaz brûlés

Nous posons :

$$\bar{W} = \frac{D_t}{D_{t_o}} \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{(1+\chi\tilde{c})^2} \tag{3.68}$$

Nous donnons également ici l'expression de la dérivée $\bar{W}'$ de $\bar{W}$ par rapport à $\tilde{c}$, que nous utiliserons par la suite, soit :

$$\bar{W}' = \frac{D_t}{D_{t_o}} \frac{1-\tilde{c}}{(1+\chi\tilde{c})^2} - \frac{D_t}{D_{t_o}} \frac{\tilde{c}}{(1+\chi\tilde{c})^2} - 2\chi \frac{D_t}{D_{t_o}} \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{(1+\chi\tilde{c})^3} + \frac{1}{D_{t_o}} \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{(1+\chi\tilde{c})^2} \frac{dD_t}{d\tilde{c}} \tag{3.69}$$

et nous notons que $W'(0) = 1$ et que $W'(1) = -\frac{D_{t_1}}{D_{t_o}} \frac{1}{(1+\chi)^2} < 0$.

Équation caractéristique au voisinage des gaz frais Nous recherchons dans ce voisinage du point $(P = 0, \tilde{c} = 0)$ la solution de l'équation 3.66 sous la forme linéaire $P = s\tilde{c}$. En utilisant le développement limité au premier ordre de $\bar{W}(\tilde{c})$ au voisinage de $\tilde{c} = 0$, soit $\bar{W}(\tilde{c}) = \bar{W}'(0)\tilde{c} + O(\tilde{c})$ et en injectant la forme linéaire recherchée dans l'équation 3.66, on obtient alors l'équation caractéristique suivante :

$$s^2 - s + \frac{1}{\Lambda^2} = 0 \tag{3.70}$$

Cette équation a des racines réelles si $1 - \frac{4}{\Lambda^2} \geq 0$, c'est à dire si $\Lambda \geq 2$ ou, de manière équivalente, si $S_t \geq 2\ S_{réf} = 2\left(\frac{C_{CLE}\ \varepsilon_f\ D_{t_o}}{k_f}\right)^{\frac{1}{2}}$. Comme les racines sont de même signe, le point $(P = 0, \tilde{c} = 0)$ est un nœud.

Équation caractéristique au voisinage des gaz brûlés Pour obtenir l'équation caractéristique au point $(P = 0, \tilde{c} = 1)$, effectuons le changement de variable suivant :

$$\theta = 1 - \tilde{c} \tag{3.71}$$

L'équation 3.66 peut se réécrire sous la forme suivante :

$$P\frac{dP}{d\theta} = -P + \frac{1}{\Lambda^2}\bar{W}^*(\theta) \tag{3.72}$$

avec $\bar{W}^*(\theta) = \frac{D_t}{D_{t_o}} \frac{\theta(1-\theta)}{(1+\chi-\chi\theta)^2}$. Au voisinage des gaz brûlés, au point $(P = 0, \tilde{c} = 1)$ soit $(P = 0, \theta = 0)$, on peut écrire que :

$$\bar{W}^*(\theta) = \bar{W}'^*(0)\theta + O(\theta) \text{ avec } \bar{W}'^*(0) = -\bar{W}'(1) > 0 \tag{3.73}$$

En recherchant la solution sous la forme $P = s\ \theta$,on obtient alors l'équation caractéristique suivante :

$$s^2 + s - \frac{1}{\Lambda^2}\bar{W}'^*(0) = s^2 + s + \frac{1}{\Lambda^2}\bar{W}'(1) = 0 \tag{3.74}$$

Cette équation a des racines réelles si $1 - \frac{4\bar{W}'(1)}{\Lambda^2} > 0$, ce qui est toujours vérifié puisque $\bar{W}'(1)$ est négatif. Comme ces racines sont de signes différents, le point $(0, 1)$ est un point de selle.

Ainsi, seul le noeud au niveau des gaz frais impose une condition restrictive sur la vitesse de propagation S_t, condition qui s'écrit :

$$S_t \geq 2\, S_{réf} = 2\, \left(\frac{C_{CLE}\, \varepsilon_f\, D_{t_o}}{k_f} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.75}$$

Il existe donc un spectre infini de vitesse de propagation possible, borné par une vitesse minimale, $S_{réf}$, qui est souvent appelée vitesse KPP et que nous noterons S_{KPP}. Dans les simulations numériques instationnaires résolvant un système d'équations très semblables à celui que nous avons considéré ici (Fichot et al., [29], Corvellec et al.[23]) et destinées à étudier quelle vitesse du spectre est effectivement sélectionnée par la flamme turbulente 1D, il apparaît que la vitesse S_{KPP} est effectivement celle qui correspond au régime stable de propagation, ce que nous supposerons donc également être le cas ici. Ainsi, nous pouvons estimer, certes assez grossièrement compte-tenu des hypothèses faites au niveau de la constance de l'échelle de temps intervenant dans le terme source moyen, quelle est l'influence de la modification de la valeur de C_{CLE} sur la stabilisation de l'écoulement moyen modélisé à richesse constante. Commençons tout d'abord par simplifier quelque peu la relation 3.75 en réexprimant le coefficient de transport D_{t_o}. Si nous appelons Sc_t le nombre de Schmidt défini par $Sc_t = \frac{\mu_{t_0}}{D_{t_o}}$ et que nous le supposons constant, en reprenant une formulation de type $k-\varepsilon$ pour exprimer μ_{t_0}, ce qui permet d'exprimerD_{t_o}comme $D_{t_o} = \rho_f \frac{C_\mu}{Sc_t} \frac{k_f^2}{\varepsilon_f}$, nous pouvons alors exprimer S_{KPP} sous la forme $S_{KPP} = 2\, \left(\frac{C_{CLE} C_\mu}{Sc_t} k_f \right)^{\frac{1}{2}}$. Considérons maintenant, et ce d'un point de vue purement cinématique, notre objet flamme plane turbulente caractérisée par une vitesse moyenne de propagation par rapport au gaz frais égale à $S_t = S_{KPP} = 2\, \left(\frac{C_{CLE} C_\mu}{Sc_t} k_f \right)^{\frac{1}{2}}$ et supposons que nous essayions de stabiliser cette flamme turbulente infinie au sein d'un écoulement de gaz frais dont la vitesse moyenne est $U_{\inf}$ par rapport au repère du laboratoire et que nous supposerons uniforme. Si $U_{\inf} = S_t$, alors le front plan moyen sera stationnaire par rapport au repère du laboratoire et sera normal à la direction de l'écoulement de gaz frais. Si $U_{\inf} < S_t$ ou $U_{\inf} > S_t$, alors le front plan moyen sera toujours normal à la direction de l'écoulement mais il sera mobile dans le repère du laboratoire, son sens de propagation dépendant du cas considéré. Dans le cas où $U_{\inf} > S_t$, on peut néanmoins imaginer une autre configuration qui permette de stabiliser le front moyen dans le repère du laboratoire.

En effet, puisqu'il suffit que la vitesse normale au front moyen soit égale à S_{KPP}, une diminution de l'inclinaison du front moyen par rapport à la direction de l'écoulement d'un angle $\alpha = \arccos \frac{S_{KPP}}{U_\infty}$ permettra donc de stabiliser celui-ci dans le repère du laboratoire, comme il est présenté sur la figure **??**. Toute chose égale par ailleurs, une augmentation de la valeur de C_{CLE} conduira donc à diminuer l'angle α d'inclinaison de la normale au front moyen par rapport à la direction de l'écoulement incident. Cette brève analyse permet donc de comprendre avant même de réaliser les simulations numériques sur ORACLES, quelle sera la tendance du changement

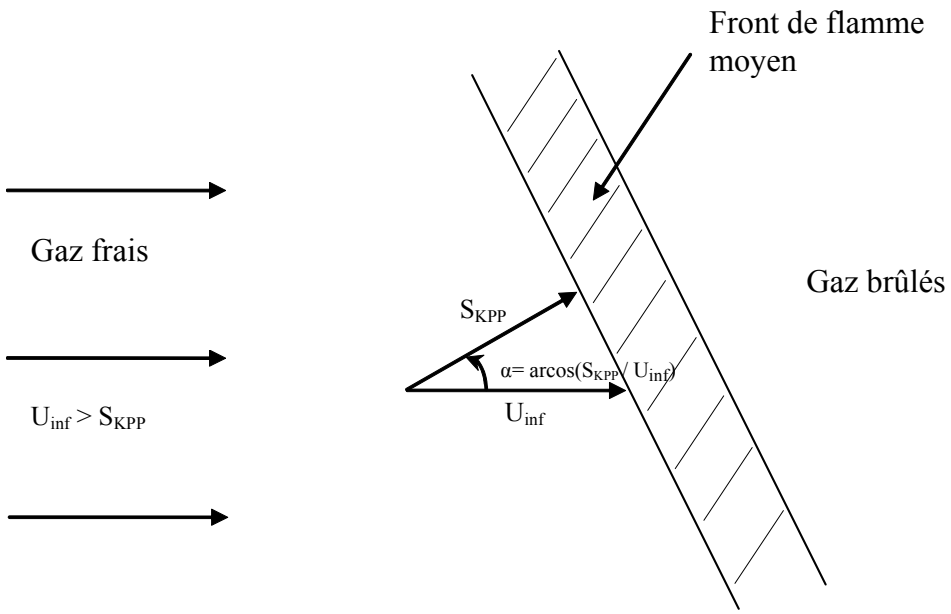

FIG. 3.6 – Stabilisation d'une flamme plane turbulente calculée avec un modèle EBU, de vitesse moyenne normale aux gaz frais égale à S_{KPP} dans un écoulement de gaz frais de vitesse $U_{\text{inf}} > S_{KPP}$.

de positionnement d'ensemble de la zone de réaction moyenne induit par un changement de la valeur de C_{CLE}.

3.3 Conclusion

Nous achevons ici la présentation de l'ensemble des modèles physiques que nous avons utilisés dans le cadre de notre travail et nous pouvons maintenant passer à la présentation des programmes de calculs et des méthodes numériques employées afin de résoudre les équations d'évolution issues de la mise en oeuvre de ces modèles physiques.

Chapitre 4

Programmes de calcul et méthodes numériques associées

4.1 Programme N3Snatur : Méthode volumes finis/éléments finis avec préconditionnement pour les bas nombres de Mach, pour les calculs en géométrie bidimensionnelle

4.1.1 Introduction

Dans cette section, nous présentons la méthode numérique volumes finis/éléments finis sur laquelle repose le programme N3Snatur (Version 1.4.3) qui est utilisé afin de résoudre les équations de bilan obtenues sur la base de la modélisation physique précédemment décrite. Ces équations de bilan se composent de termes convectifs, de termes diffusifs et de termes sources dont les propriétés mathématiques particulières ont conditionné le choix des stratégies numériques distinctes à retenir pour les calculer. Le principe de la méthode numérique consiste, à partir de la forme faible de la formulation intégrale du système, à rechercher la solution numérique soit par une fonction constante par morceau pour réaliser un décentrage des flux convectifs dans une approche volumes finis, soit par une fonction linéaire par morceau pour évaluer les flux diffusifs et termes sources dans une approche éléments finis. Dans cette double approche, les variables physiques, dans le domaine de calcul noté Ω, sont discrétisées dans l'espace par des éléments finis triangulaires de type $\mathcal{P}_1$. Ces éléments constituent géométriquement un maillage noté $\mathcal{T}_h$[1] qui sert de base pour la construction d'un maillage dual de cellules (ou volumes) de contrôle notés $\mathcal{C}_i$, autour de chaque nœud i du maillage $\mathcal{T}_h$.

L'originalité de la méthode réside essentiellement dans le calcul des flux convectifs décentrés des variables hydrodynamiques, la convection des variables turbulentes et fractions massiques[2]

[1] Le maillage ainsi créé devant recouvrir complètement le domaine de calcul, $\mathcal{T}_h$ est dit conforme.

[2] Les vecteurs des variables hydrodynamiques, turbulentes et fractions massiques sous forme conservative

en découlant directement. Celui-ci est ramené à la résolution d'un problème de Riemann entre chacune des interfaces cellulaires Γ_{ij} entre les nœuds ij appartenant aux cellules de contrôle voisines $\mathcal{C}_i$ et $\mathcal{C}_j$ comme l'illustre la figure 4.1. Le solveur de Riemann approché de Roe [66] est dans notre cas utilisé pour décentrer le flux numérique convectif. Ce solveur a initialement été conçu pour les écoulements compressibles transsoniques pour lesquels il s'avère bien adapté. Afin de l'appliquer aux écoulements à petit nombre de Mach, Turkel [77] [78] [33] a proposé, un préconditionnement de ce solveur qui permet d'accélérer la convergence de la résolution du système linéaire [82] [81] en homogénéisant les vitesses des ondes acoustiques et matérielles. Ce solveur ainsi préconditionné, connu comme le schéma de Roe-Turkel pour les écoulements à faibles nombres de Mach, est ensuite décrit plus en détail.

4.1.2 Maillage volumes finis/éléments finis en géométrie bidimensionnelle

Le maillage utilisé consiste en une triangulation $\mathcal{T}_h$ du domaine de calcul Ω, soit :

$$\Omega = \bigcup_{k=1}^{N_T} T_k \quad avec \quad T_k \in \mathcal{T}_h \tag{4.1}$$

où les T_k sont les éléments triangulaires et N_T le nombre d'éléments de $\mathcal{T}_h$. Ce maillage est généré en utilisant les modules HEXA ou QUAD du mailleur ICEMCFD (V.4.2.2).

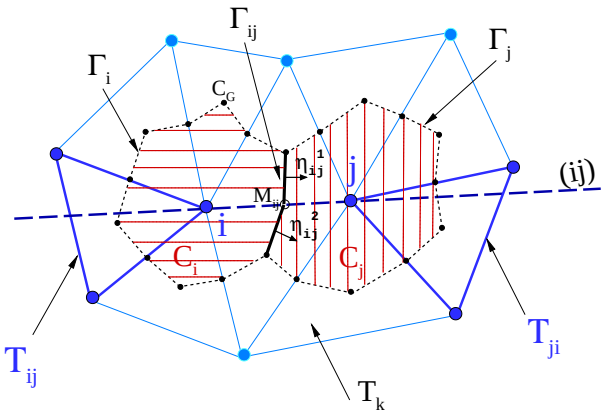

FIG. 4.1 – Représentation schématique du maillage dual considéré.

À partir du maillage ainsi obtenu, une approche "cell-vertex" est utilisée afin de construire les cellules (ou volumes) de contrôle $\mathcal{C}_i$ sur lesquelles les différents termes seront effectivement

s'écrivent : $\mathbf{q}_E=[\rho, \rho u, \rho v, \rho w, \rho\phi]^T$; $\mathbf{q}_T=[\rho k, \rho\varepsilon]^T$; $\mathbf{q}_Y=[\rho Y_1, ...\rho Y_n]^T$.

évalués. La figure 4.1 montre un détail de la construction de ce maillage dual. La notation utilisée sur cette figure est la suivante :

- C_i (resp. C_j) : Cellule ou volume de contrôle construite autour du noeud indicé i (resp. j)
- Γ_i (resp. Γ_j) : Frontière du volume de contrôle C_i (resp. C_j)
- Γ_{ij} : Portion de frontière commune à Γ_i et Γ_j
- C_G : Centre de gravité du triangle T_{k_i} sous-ensemble de T_k et voisin au nœud i
- M_{ij} : Milieu du segment joignant les noeuds i et j
- (ij) : Droite passant par les noeuds indicés i et j
- T_{ij} (resp. T_{ji}) : Triangle amont (resp. aval) au noeud i (resp. j) intersectant la droite (ij)
- $\eta_{ij} = \int_{\Gamma_{ij}} \eta_i \, dl$: normale moyenne à Γ_{ij}.

Les frontières des cellules sont ainsi construites à partir des éléments triangulaires T_k en reliant les milieux des arêtes M_{ij} (connectées à i) aux centres de gravité $\mathcal{C}_G$ des triangles T_{k_i} ayant le noeud i en commun. Chaque élément fini associé à un élément triangulaire T_k intervient ainsi dans les bilans effectués sur trois cellules de contrôle. La frontière Γ_i de $\mathcal{C}_i$ se décompose en frontières élémentaires Γ_{ij} qui séparent le noeud i avec ces nœuds voisins. L'ensemble de ces noeuds voisins de i sera noté $\mathcal{C}_{k_i}$. Par construction, les volumes de contrôle $\mathcal{C}_i$ recouvrent entièrement le domaine de calcul et ne se chevauchent pas de sorte que la conformité du maillage est assurée, soit : $\Omega = \bigcup_{i=1}^{N_\mathcal{C}} \mathcal{C}_i$ où $N_\mathcal{C}$ est le nombre des cellules ou volumes de contrôle.

4.1.3 Principes de la méthode mixte

Formulation forte ou différentielle

En regroupant les termes convectifs, diffusifs et sources, le système complet des équations aérothermochimiques se réécrit, dans un repère cartésien et en deux dimensions d'espace, sous la forme tensorielle suivante :

$$\partial_t \mathbf{q} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{q}) = \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{q}) + \mathbf{s} \tag{4.2}$$

où $\mathbf{q}$ représente le vecteur des variables conservatives, $\mathbf{f}$ les termes de flux convectifs, $\mathbf{d}$ les termes de flux diffusifs (visqueux et turbulents) et $\mathbf{s}$ le terme source.

Formulation variationnelle

La formulation variationnelle discrète du problème continu dans un domaine Ω de frontière $\partial\Omega$ découle directement de la formulation intégrale du bilan 4.2. Quelle que soit la fonction test f choisie sur l'ensemble des fonctions de carré intégrable sur le domaine physique considéré (i.e. $\forall f \in L^2(\Omega)$), le vecteur d'état conservatif $\mathbf{q}$ doit vérifier :

$$\int_\Omega \partial_t \mathbf{q}\ f\ d\Omega + \int_\Omega \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{f}\ f\ d\Omega = \int_\Omega \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{d}\ f\ d\Omega + \int_\Omega \mathbf{s}\ f\ d\Omega \tag{4.3}$$

On recherche alors la solution sous la forme discrète suivante :

$$\mathbf{q}_h\,(x,y) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{q}_i\ g_i\,(x,y) \tag{4.4}$$

où g_i, i variant de 1 à $N_\rfloor$, représente la base de l'espace d'approximation. La formulation volumes finis/éléments finis nous amène à considérer deux espaces d'approximation distincts.

Formulation volumes finis

La formulation volumes finis consiste à rechercher une fonction $\mathbf{q}_h(x,y)$ constante sur chacun des volumes $\mathcal{C}_i$, soit :

$$\mathbf{q}_h\,(x,y) = \sum_{i=1}^{N_\mathcal{C}} \mathbf{q}_i\ \Phi_i\,(x,y) \tag{4.5}$$

ce qui revient à considérer comme base de l'espace d'approximation l'ensemble des fonctions $g_i = \Phi_i\,(x,y)$ définies sur les cellules $\mathcal{C}_i$ de la façon suivante :

$$\Phi_i\,(x,y) = \begin{cases} \Phi_i(x,y) = 1 \ \ si \ \ (x,y) \in \mathcal{C}_i \\ \Phi_i(x,y) = 0 \ \ si \ \ (x,y) \notin \mathcal{C}_i \end{cases} \tag{4.6}$$

où (x,y) sont les coordonnées d'un point sur le domaine Ω et $\mathbf{q}_i$ est le vecteur conservatif au nœud i.

Formulation éléments finis

Dans la formulation éléments finis, chaque variable physique $q_h(x)$ est cherchée, comme une fonction continue, linéaire par morceaux sur chacun des triangles T_k (Annexe A), soit :

$$\mathbf{q}^h(x) = \sum_{k=1}^{T_k} \Phi'_k(x,y)\ N_k(x,y)$$

où $\Phi'_k(x,y)$ est la fonction indicatrice du triangle indicé k.

La fonction d'interpolation N_k sur chaque triangle T_k est réexprimée dans la base des fonctions de base linéaires φ_i associées à chaque noeud i du triangle T_{k_i}. En notant $\mathcal{S}(T_{k_i})_{k_i=1..3}$ l'ensemble des indices des sommets de T_{k_i}, on a :

$$N_k(x,y) = \sum_{i \in \mathcal{S}(T_{k_i})} q_i \varphi_i(x,y) \tag{4.7}$$

Équivalence éléments-finis, volumes-finis

L'équivalence des deux formulations éléments-finis/volumes-finis impose que la valeur constante $\mathbf{q}_i$ de l'approximation volumes-finis $\mathbf{q}_h$ sur le volume $\mathcal{C}_i$ soit égale à la moyenne integrée de l'approximation éléments-finis $\mathbf{q}^h$ sur l'ensemble des portions des éléments finis T_{k_i} intersectant $\mathcal{C}_i$, soit :

$$\int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{q}_i \; dV = \sum_{k \in T_{k_i}} \int_{\mathcal{C}_i \cap T_k} \mathbf{q}^h dV \tag{4.8}$$

Application de la formulation mixte

En appliquant alors la formulation volumes finis pour les termes temporels et convectifs et la formulation éléments finis pour les termes sources et diffusifs, et en s'assurant par reconstruction des valeurs moyennes que la condition 4.8 est respectée, le bilan 4.3 se réécrit pour un volume de contrôle $\mathcal{C}_i$ selon :

$$\underbrace{\int_{\Omega_i} \partial_t \mathbf{q}_h \; \Phi \; d\Omega}_{\text{Terme temporel}} + \underbrace{\int_{\Omega_i} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{q}_h) \; \Phi \; d\Omega}_{\text{Flux convectifs}} = \underbrace{\int_{\Omega_i} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \; N_i \; d\Omega}_{\text{Flux diffusifs}} + \underbrace{\int_{\Omega_i} \mathbf{s}(\mathbf{q}^h) \; N_i \; d\Omega}_{\text{Terme source}} \tag{4.9}$$

Le maillage étant fixe, l'application des théorèmes de transport de Reynolds et de "flux-divergence"[3] nous conduit alors à[4] :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{q} \; dV}_{\text{Terme temporel}} + \underbrace{\oint_{\Gamma_i} \left(\mathbf{f}_x(\mathbf{q}) \cdot \eta_x + \mathbf{f}_y(\mathbf{q}) \cdot \eta_y \right) \; dS}_{\text{Flux convectifs}} =$$
$$\underbrace{\oint_{\Gamma_i} \left(\mathbf{d}_x(\mathbf{q}) \cdot \eta_x + \mathbf{d}_y(\mathbf{q}) \cdot \eta_y \right) \; N_i \; dS}_{\text{Flux diffusifs}} + \underbrace{\int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{s}(\mathbf{q}) \; N_i \; dV}_{\text{Terme source}} \tag{4.10}$$

où η_x et η_y, sont les composantes de la normale unitaire sortante $\boldsymbol{\eta}_i$ à la frontière Γ_i de la cellule $\mathcal{C}_i$ et où les indices x et y correspondent aux directions de dérivations considérées.

Introduction des notations pour l'obtention de la formulation discrète

Nous introduisons les expressions symboliques suivantes :

[3] Dans la littérature, ce théorème est attribué soit à Gauss, soit à Green, soit à Green-Ostrogradsky ou encore Gauss-Ostrogradsky.

[4] Dans cette expression et pour des raisons de clarté, et dans le but d'alléger la notation, l'indice ou exposant h du vecteur discret $\mathbf{q}$ (4.4), ne sera plus noté.

– $\mathbf{Q}_i^n$ pour le vecteur d'état conservatif discret, qui représente donc l'approximation de la moyenne de l'état conservatif sur la cellule $\mathcal{C}_i$ de volume V_i à l'instant t^n. Nous introduisons de même les états à gauche $\mathbf{Q}_{ij}^n$ et à droite $\mathbf{Q}_{ji}^n$ de l'interface $\Gamma_{ij} = \Gamma_i \cap \Gamma_j$ entre $\mathcal{C}_i$ et $\mathcal{C}_j$, soit :

$$\mathbf{Q}_i^n = (\rho_i,\ \rho_i u_i,\ \rho_i v_i,\ \rho_i E_i)^T \simeq \frac{1}{V_i} \int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{q}\,(x, t^n)\, dV \tag{4.11}$$

– $\mathbf{F}_{ij}\,(\mathbf{Q}_{ij}, \mathbf{Q}_{ji}, \mathbf{n}_{ij})$ pour le flux numérique convectif qui représente l'approximation du flux moyen constant pendant l'intervalle de temps Δt, fonction de ces deux états adjacents à l'instant t^n, soit :

$$\mathbf{F}_{ij}\,(\mathbf{Q}_{ij}, \mathbf{Q}_{ji}, \mathbf{n}_{ij}) \simeq \sum_{j \in \mathcal{C}_{k_i}} \oint_{\Gamma_{ij}} \mathbf{f}_x(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{ij}_x} + \mathbf{f}_y(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{ij}_y}\, dS$$

la normale moyenne unitaire à Γ_{ij} étant donnée par :

$$\mathbf{n}_{ij} = \frac{l_1 \mathbf{n}_{\mathbf{ij}}^{\mathbf{1}} + l_2 \mathbf{n}_{\mathbf{ij}}^{\mathbf{2}}}{l_1 + l_2}$$

où $\mathbf{n}_{\mathbf{ij}}^{\mathbf{1}}$ et $\mathbf{n}_{\mathbf{ij}}^{\mathbf{2}}$ sont les normales unitaires des segments composant Γ_{ij} et dont les longueurs sont respectivement l_1 et l_2.

– $\mathbf{D_i}$ pour les flux diffusifs numériques qui représentent l'approximation du flux diffusif, constant pendant dt, à travers la frontière Γ_{ij}, soit :

$$\mathbf{D}_i\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_j, \nabla\varphi_{ij}; j \in \mathcal{C}_{k_i}, j \in T_{k_j}\right) \simeq \int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{d_x} \cdot n_x + \mathbf{d_y} \cdot n_y\, dS \tag{4.12}$$

– $\mathbf{S}_i$ pour le vecteur source numérique pour l'approximation du vecteur source constant pendant dt et qui ne dépend que de l'état moyen et des gradients sur la cellule $\mathcal{C}_i$, soit :

$$\mathbf{S}_i\left(\mathbf{Q}_i, \nabla\varphi_{ij}; j \in \mathcal{C}_{k_i}, j \in T_{k_j}\right) \simeq \int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{S}\, dV \tag{4.13}$$

Les gradients sur $\mathcal{C}_i$ desquels dépendent ces termes sources et de flux diffusifs sont évalués en fonction des états aux noeuds voisins et des gradients des fonctions de base φ_{ij} sur les triangles participant à la construction de la cellule. La mise à jour des valeurs aux noeuds en cours de calcul s'effectuera alors par le bilan implicité décrit dans la section 4.1.6.

4.1.4 Évaluation des flux convectifs

Le solveur hyperbolique utilisé dans N3SNatur est conçu de façon à pouvoir être utilisé également pour des écoulements présentant des discontinuités. A cette fin, une procédure de décentrage a été privilégiée pour évaluer les flux convectifs plutôt qu'une évaluation centrée avec ajout de viscosité artificielle. Ce décentrage est généralement introduit :

- soit par une méthode de découpage de flux **FVS**, via laquelle le flux numérique est directement composé de deux contributions, en amont et en aval, et dont l'expression des composantes dépend du nombre de Mach local. Ces méthodes sont plus robustes et plus simples à mettre en oeuvre, mais introduisent généralement une diffusion numérique trop importante pour capturer correctement les couches limites, leur décollement, leur ré-attachement ansi que les zones de cisaillements.
- soit par une méthode de découpage des différences de flux **FDS**. Basée sur le schéma de Godunov, l'évolution en temps d'une discontinuité initiale (entre deux états constants différents sur deux volumes finis adjacents), est calculée par la résolution d'un problème de Riemann [74] à chaque interface Γ_{ij}, via lequel on décompose l'accroissement de flux en fonction des accroissements élémentaires liés à la propagation des ondes caractéristiques. Ce solveur donne une solution $\mathcal{Q}(x/t)$ en fonction des conditions initiales $\mathbf{Q}_i$ et $\mathbf{Q}_j$ et de la direction η_{ij}.

Dans cette section, nous présentons notamment les principes des méthodes de décentrage basées sur la résolution du problème de Riemann. Nous détaillons plus particulièrement l'approche de Roe que nous avons retenue ainsi que sa version préconditionnée (schéma de Roe-Turkel) utilisée pour accélérer la convergence.

Rappel des propriétés fondamentales des équations d'Euler en variables conservatives

En considérant le vecteur d'état conservatif en une dimension d'espace : $\mathbf{q} = (\rho, \rho u, \rho\mathcal{E})^T$ et le vecteur de flux convectif $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = \big(\rho u, \rho u^2 + p, u(\rho\mathcal{E} + p)\big)^T$, le système des équations d'Euler à une dimension d'espace s'écrit en formulation conservative selon :

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{q})}{\partial x} = 0 \tag{4.14}$$

À partir de l'équation d'état du gaz parfait, l'énergie totale par unité de volume $\mathcal{E}$ peut être obtenue comme :

$$\mathcal{E} = \rho\frac{u^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1} \tag{4.15}$$

En réexprimant la pression et les composantes du flux en fonction des variables conservatives du système et en dérivant chaque composante par rapport à chaque variable, on montre alors que le flux $\mathbf{f}_x(\mathbf{q})$ est homogène de degré un par rapport au vecteur d'état conservatif, soit :

$$\mathbf{f}_x(\mathbf{q}) = \mathcal{B}\mathbf{q} \tag{4.16}$$

où

$$\mathcal{B} = \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \tag{4.17}$$

est la matrice jacobienne du flux[5].

Ceci nous permet de réexprimer le système 4.14 selon :

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathcal{B}\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0 \tag{4.18}$$

On peut alors montrer que le système 4.14 est hyperbolique. À partir de la réécriture équivalente du système sous la forme 4.16, dite quasi-linéaire, on montre en effet que la matrice $\mathcal{B}$ est diagonalisable à valeurs propres réelles.

Dans le cas à une dimension d'espace, en introduisant la vitesse du son $a = \sqrt{\frac{\gamma P}{\rho}}$, les valeurs propres de $\mathcal{B}$ sont :

$$\lambda_1 = u - a,\ \lambda_2 = u,\ \lambda_3 = u + a$$

et les équations caractéristiques deviennent :

$$\begin{cases} dp - \rho a\, du = 0 & sur \quad dx/dt = u - a \\ dp - a^2 d\rho = 0 & sur \quad dx/dt = u \\ dp + \rho a\, du = 0 & sur \quad dx/dt = u + a \end{cases} \tag{4.19}$$

Ces relations conditionnent la prescription des conditions limites au niveau des frontières d'entrée et de sortie du domaine de calcul en considérant la direction normale à chaque facette de bord sur laquelle l'état du fluide dépend localement à la fois de l'état intérieur et de l'état extérieur au domaine de calcul (cf. § 4.1.7). Les valeurs propres λ_i du système représentent les vitesses d'ondes propageant les ondes élémentaires de discontinuités associées au système, dont l'amplitude est respectivement donnée par chaque vecteur propre à droite.

Présentation du problème de Riemann

L'approche volumes-finis retenue pour l'évaluation des termes convectifs nous amène à considérer, au niveau de chaque interface Γ_{ij} séparant les volumes de contrôle $\mathcal{C}_i$ et $\mathcal{C}_j$, une discontinuité entre deux états $\mathbf{q_i}$ et $\mathbf{q_j}$ respectivement. Il s'agit alors de considérer, dans la direction donnée par $\mathbf{n_{ij}}$, le problème de Riemann suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{q})}{\partial x} = 0 \\ \mathbf{q}(x,0) = \begin{cases} \mathbf{q}_i & si \ \ x < 0 \\ \mathbf{q}_j & si \ \ x > 0 \end{cases} \end{cases} \tag{4.20}$$

où on suppose que l'interface séparant deux états $\mathbf{q}_i$ et $\mathbf{q}_j$, est localisée en $x = 0$ dans le repère local associé à Γ_{ij}.

[5] La structure complète de cette matrice en une, deux ou trois dimensions d'espace est détaillée dans différents ouvrages tels que ceux de *Toro*[74] ou Hirsch[39][38].

La résolution de ce problème revient physiquement à considérer localement l'évolution d'un gaz dans un tube à choc, l'interface jouant le rôle d'un diaphragme séparant deux gaz portés dans un état différent dans chaque volume de contrôle. La solution de ce problème (voir la figure 4.2) est similaire en temps (ne dépend en fait que du rapport $\frac{x}{t}$). Aux ondes simples, de vitesses données par les valeurs propres λ_1, λ_2 et λ_3 de la matrice jacobienne du flux, correspondent les champs caractéristiques associés aux vecteurs propres à droite $\mathbf{K}_1$, $\mathbf{K}_2$ et $\mathbf{K}_3$ qui la diagonalisent. Les courbes caractéristiques (de pentes égales aux inverses des vitesses d'onde simple), séparent ainsi le domaine d'espace-temps (t>0) en quatre zones distinctes et laissent apparaître deux nouveaux états $\mathbf{q}_i^*$ et $\mathbf{q}_j^*$.

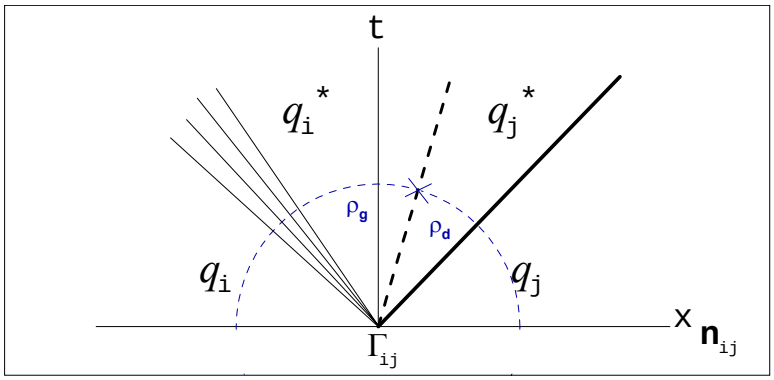

FIG. 4.2 – Solution du problème de Riemann pour le système monodimensionnel des équations d'Euler.

L'évaluation de l'état constant qui en résulte au niveau de l'interface donne alors accès au flux numérique que nous recherchons. L'onde centrale représente une onde de glissement qui propage un saut de vitesse tangentielle tout en conservant la pression et la vitesse normale. En fonction des états $\mathbf{q}_i^*$ et $\mathbf{q}_j^*$, les deux autres ondes correspondent soit à une onde de choc, soit à une onde de détente. L'onde de détente propage (entre le pied et la queue de la détente) un saut continu de la pression, de la vitesse normale et de la masse volumique, tandis que l'onde de choc propage un saut discontinu de ces variables. La combinaison de l'ensemble de ces relations de saut permet d'aboutir à une équation implicite pour le saut de pression à travers le choc par exemple, qui peut alors être résolue itérativement.

Évaluation du flux numérique à l'interface

La solution ainsi obtenue est similaire en temps mais l'état du fluide reste constant au niveau de l'interface Γ_{ij} pendant l'intervalle de temps d'intégration en temps. Le flux numérique peut ainsi se réexprimer soit en évaluant l'expression du vecteur flux en cet état ainsi déterminé, soit en reconstruisant directement les composantes du flux par addition de chaque contribution (différence de flux élémentaire) relative à chaque onde élémentaire. Si la discontinuité initiale se

décompose dans la base des vecteurs propres à droite selon :

$$\mathbf{Q}_i - \mathbf{Q}_j = \sum_{k=1}^{3} \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k$$

l'état intermédiaire $\mathbf{Q}_{ij}^*$ à l'interface (constant entre t et $t + \Delta t$, à condition que Δt soit suffisamment petit pour que les ondes issues d'autres interfaces ne puissent interagir avec cet état) est alors déterminé par :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{ij}^* &= \mathbf{Q}_i + \textstyle\sum_{k\ /\ \lambda_k < 0} \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k \\ &= \mathbf{Q}_j + \textstyle\sum_{k\ /\ \lambda_k > 0} \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k \end{aligned} \tag{4.21}$$

Le flux évalué en cet état se réexprime alors selon :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_j\right) &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_i\right) + \textstyle\sum_{k\ /\ \lambda_k < 0} \lambda_{ij}^k \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k \\ &= \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_j\right) - \textstyle\sum_{k\ /\ \lambda_k > 0} \lambda_{ij}^k \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k \end{aligned} \tag{4.22}$$

De façon équivalente, ce flux peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\mathbf{F}_{ij}\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_j\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_i\right) + \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_j\right)\right) - \frac{1}{2}\sum_k \left|\lambda_{ij}^k\right| \alpha_{ij}^k \mathbf{K}_k \tag{4.23}$$

où l'on voit explicitement apparaître le terme de viscosité numérique corrigeant le flux moyen instable. De par la propriété d'invariance rotationnelle du système d'équations d'Euler, ce principe de reconstruction du flux peut s'étendre directement en configuration bidimensionnelle en considérant la direction de la normale moyenne à l'interface. Dans ce cas, on dénote simplement, par rapport au cas monodimensionnel, l'apparition d'une valeur propre double ($\lambda_1 = u - a$, $\lambda_2 = \lambda_3 = u$, $\lambda_4 = u + a$). Tandis que λ_2 correspond toujours à l'onde de discontinuité de contact déjà identifiée, qui introduit un saut de la vitesse normale et de masse volumique, la valeur propre λ_3 correspond à une onde entropique de cisaillement qui introduit un saut combiné de masse volumique et de vitesse transversale.

Solveur de Roe : résolution exacte d'un problème de Riemann linéarisé

La résolution itérative du problème de Riemann étant trop coûteuse en temps de calcul, nous utilisons la méthode de Roe [66] qui consiste à linéariser localement le problème de Riemann à l'interface Γ_{ij}. Dès lors, nous ne cherchons plus à déterminer la solution analytique du problème de Riemann exact (4.20) mais la solution discrète du problème de Riemann approché suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathcal{A}_{\mathbf{ij}} \dfrac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0 \\ \mathbf{Q}(x,0) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{Q}_i = (\rho_i, \rho_i u_i, \rho_i v_i, \rho_i E_i)^T \ \ si \ \ x \in C_i \\ \mathbf{Q}_j = (\rho_j, \rho_j u_j, \rho_j v_j, \rho_j E_j)^T \ \ si \ \ x \in C_j \end{array} \right. \end{array} \right. \tag{4.24}$$

où la matrice de Roe $\mathcal{A}_{ij}$ est cherchée de façon à assurer :

- L'hyperbolicité du système,
- La consistance du flux : $\mathbf{F}_{ij}\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_i\right) = \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_i\right)$,
- Le maintien de la conservativité discrète (afin d'obtenir la bonne vitesse de propagation d'une discontinuité localisée entre les positions des noeuds i et j).

Cette approche revient en fait à simplifier la structure caractéristique du système en ne considérant plus que deux ondes de choc. La matrice de Roe ainsi recherchée est en fait identique à la matrice Jacobienne locale pour laquelle les variables sont simplement redéfinies comme des moyennes des états à gauche et à droite, pondérées par les racines carrées des masses volumiques à gauche et à droite.

L'algorithme de *Roe* que nous utilisons peut se résumer de la façon suivante :

- Dans un premier temps, la valeur moyenne de *Roe* des variables $(\rho_R, u_R, v_R, H_R, a_R)$ est calculée selon :

$$\begin{cases} \rho_R = \sqrt{\rho_i \rho_j} \\ u_R = \frac{u_i\sqrt{\rho_i}+u_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i}+\sqrt{\rho_j}} \\ v_R = \frac{v_i\sqrt{\rho_i}+v_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i}+\sqrt{\rho_j}} \\ H_R = \frac{H_i\sqrt{\rho_i}+H_j\sqrt{\rho_j}}{\sqrt{\rho_i}+\sqrt{\rho_j}} \\ a_R = \sqrt{(\gamma-1)\left[H_R - \frac{1}{2}(u_R^2+v_R^2)\right]} \end{cases} \tag{4.25}$$

- Nous en déduisons directement l'expression des vitesses d'ondes et des vecteurs propres à droite, soit :

$$\begin{cases} \lambda_{ij^1} = u_R - a_R \\ \lambda_{ij^2} = \lambda_{ij^3} = u_R \\ \lambda_{ij^4} = u_R + a_R \end{cases} \tag{4.26}$$

et

$$\begin{gathered} \mathbf{K}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ u_R - a_R \\ v_R \\ H_R - u_R a_R \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ u_R \\ v_R \\ \frac{1}{2}(u_R^2+v_R^2) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{K}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ v_R \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ u_R + a_R \\ v_R \\ H_R + u_R a_R \end{pmatrix} \end{gathered} \tag{4.27}$$

- La projection de la discontinuité $\mathbf{Q}_j - \mathbf{Q}_i$ dans la base de vecteurs propres à droite nous donne alors les intensités des ondes élémentaires, soit :

$$\begin{cases} \alpha_R^3 = \rho_j v_j - \rho_i v_i - v_R(\rho_j - \rho_i) \\ \alpha_R^2 = \frac{\gamma-1}{a_R^2}\left[(\rho_j - \rho_i)(H_R - u_R^2) + u_R(\rho_j u_j - \rho_i u_i) + \rho_i E_i - \rho_j E_j + v_R(\rho_j v_j - \rho_i v_i - v_R(\rho_j - \rho_i))\right] \\ \alpha_R^1 = \frac{1}{2a_R}\left[(\rho_j - \rho_i)(u_R + a_R) + \rho_i u_i - \rho_j u_j - a_R \alpha_R^2\right] \\ \alpha_R^4 = \rho_j - \rho_i - (\alpha_R^1 - \alpha_R^2) \end{cases} \tag{4.28}$$

– Le flux de Roe se réécrit alors finalement selon :

$$\mathbf{F}_{ij}\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_j\right) = \frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_i\right) + \mathbf{F}\left(\mathbf{Q}_j\right)\right) - \sum_{k=1}^{4} \left|\lambda_R^k\right| \alpha_R^k \mathbf{K}_k\right] \tag{4.29}$$

Comportement pathologique du schéma de Roe à bas nombre de Mach

La littérature [82] [35] mentionne des difficultés pour simuler des écoulements à petit nombre de Mach avec le schéma de Roe. La précision des calculs devient en effet problématique. En effet, lorsque le nombre de Mach devient très petit, le gradient de certaines grandeurs (telles que la masse volumique ou la pression), devient en effet du même ordre de grandeur que l'imprécision induite par la linéarisation. Les travaux de Viozat [82], indiquant que la méthode de décomposition de flux de Roe telle nous pourrions l'utiliser directement avec l'expression (4.29) dégrade les solutions pour les faibles nombres de Mach. L'erreur de troncature de l'approximation du schéma de Roe d'ordre un mesurée par exemple sur l'équation de quantité de mouvement est de l'ordre de $\mathcal{O}(\frac{\Delta x}{M})$. Une alternative pour pallier ce problème, consisterait à diminuer fortement la taille des mailles pour rétablir la précision des opérations. Par ailleurs, l'obtention de solutions stationnaires (comme dans notre cas) est très difficile car elle nécessite alors de faire propager dans le domaine de calcul à la fois des ondes acoustiques très rapides (limitant le pas de temps maximal admissible) et des ondes matérielles très lentes (nécessitant un grand nombre d'itérations).

Préconditionneur de Turkel

La méthode présentée dans cette section nous permet d'accélérer la convergence tout en améliorant la précision de l'évaluation du flux numériques. Elle consiste en fait à préconditionner la matrice jacobienne du flux numérique afin de filtrer les modes acoustiques et obtenir ainsi des valeurs propres d'un même ordre de grandeur (homogénéisation de la vitesse des ondes). Le préconditionneur que nous appliquons à la matrice de Roe est celui de Turkel. Le système des équations d'Euler en configuration bidimensionnelle que nous cherchons à résoudre s'écrit sous forme quasi-linéaire en variables conservatives selon :

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathcal{B}\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathcal{P}\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = 0 \tag{4.30}$$

où $\mathbf{q}$ est le vecteur d'état conservatif et où $\mathcal{B}(\mathbf{q})$ et $\mathcal{P}(\mathbf{q})$ sont les matrices jacobiennes du flux longitudinal et du flux tangentiel respectivement. Par souci de simplification opératoire, le préconditionnement est originellement appliqué au système (4.30 réécrit en variables primitives, soit :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{B}_c \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mathcal{P}_c \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = 0 \tag{4.31}$$

où $\mathbf{u}$ est le vecteur de variables primitives. Ces deux vecteurs d'états conservatif et primitif étant donnés par :

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho \mathcal{E} \end{bmatrix} \quad , \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} p \\ u \\ v \\ \mathcal{S} \end{bmatrix}$$

où l'entropie $\mathcal{S}$ est définie par $\mathcal{S} = ln\frac{p}{\rho^\gamma}$. On introduit alors les matrices de passage permettant de passer de l'écriture de la matrice jacobienne dans un espace de phase à son écriture dans l'autre espace, soit :

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_c &= \mathcal{R} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \quad , \quad \mathcal{B} = \frac{\partial \mathbf{f}_x(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} = \mathcal{R}^{-1} \cdot \mathcal{B}_c \cdot \mathcal{R} \\ \mathcal{P}_c &= \mathcal{R} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}_y(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \quad , \quad \mathcal{P} = \frac{\partial \mathbf{f}_y(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} = \mathcal{R}^{-1} \cdot \mathcal{P}_c \cdot \mathcal{R} \end{aligned}$$

où les matrices de passage entre variables conservatives et primitives sont :

$$\mathcal{R} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{q}} \quad , \quad \mathcal{R}^{-1} = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{u}}$$

Dans le cas bidimensionnel, le vecteur de flux convectif en variables conservatives s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathbf{f}_x(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u v \\ (\mathcal{E} + p)u \end{bmatrix} \quad , \quad \mathbf{f}_y(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u v \\ \rho v^2 + p \\ (\mathcal{E} + p)u \end{bmatrix}$$

et les matrices $\mathcal{B}_c$ et $\mathcal{P}_c$ sont explicitement données par :

$$\mathcal{B}_c = \begin{bmatrix} u & \rho a^2 & 0 & 0 \\ \rho^{-1} & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u \end{bmatrix} \quad , \quad \mathcal{P}_c = \begin{bmatrix} v & 0 & \rho a^2 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ \rho^{-1} & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v \end{bmatrix}$$

Le préconditionnement du terme temporel nous conduit alors à résoudre effectivement le système suivant :

$$\mathcal{T}^{-1}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{B}_c\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mathcal{P}_c\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} = 0 \tag{4.32}$$

soit de façon équivalente :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathcal{T}\left(\mathcal{B}_c\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mathcal{P}_c\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y}\right) = 0 \tag{4.33}$$

en choisissant la matrice de précontionnement $\mathcal{T}$ de *Turkel* définie en variables primitives par :

$$\mathcal{T} = \begin{bmatrix} \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{4.34}$$

où β est un coefficient à prescrire et qui doit être de l'ordre du nombre de Mach. Lorsque ce préconditionnement est appliqué conjointement au schéma de *Roe*, *C. Viozat* montre que les modifications à apporter au solveur de *Roe* se regroupent alors autour de la composante décentrée de la fonction de flux $\mathbf{F}_{ij}\left(\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_j\right)$. La matrice de dissipation relative que l'on peut obtenir par réécriture du terme de décentrage dans le schéma de *Roe* peut s'exprimer sous la forme :

$$\mid \mathcal{A}(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \mid = \mid \mathcal{B} \cdot n_x + \mathcal{P} \cdot n_y \mid$$

où la notation $||$ correspond à la prise en valeur absolue des éléments de la matrice concernée. Pour obtenir le schéma de Roe-Turkel, on remplace alors ce terme de décentrage par :

$$\mathcal{A}^\beta(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) = \mathcal{R}^{-1}(\mathbf{q})\mathcal{T}^{-1}(\mathbf{q}) \mid \mathcal{T}\mathcal{B}_c(\mathbf{q}) \cdot n_x + \mathcal{T}\mathcal{P}_c(\mathbf{q}) \cdot n_y \mid \mathcal{R}(\mathbf{q})$$

La dissipation $\mathcal{A}^\beta$ dans sa base propre se réexprime selon :

$$\mathcal{A}^\beta(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) = \mathcal{M}^g(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \mid \Lambda(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \mid \mathcal{M}^d(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$$

où Λ est la matrice des valeur propres de $\mathcal{M} = \mathcal{T}_c\mathcal{B}_c(\mathbf{Q}) \cdot n_x + \mathcal{T}_c\mathcal{P}_c(\mathbf{Q}) \cdot n_y$, associée aux matrices de vecteurs propres à droite $\mathcal{N}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$ et à gauche $\mathcal{N}^{-1}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$ telle que :

$$\mathcal{M}(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) = \mathcal{N}(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \mid \Lambda(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) \mid \mathcal{N}^{-1}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$$

avec :

$$\mathcal{M}^g(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) = \mathcal{R}^{-1}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})\mathcal{T}_c^{-1}\mathcal{N}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$$

$$\mathcal{M}^d(\mathbf{Q}, \mathbf{n}) = \mathcal{N}^{-1}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})\mathcal{R}(\mathbf{Q}, \mathbf{n})$$

Les matrices étant ainsi préconditionnées dans les expressions précédentes pour le système primitif, il reste à passer leur expression dans le système conservatif via les matrices $\mathcal{R}$ et $\mathcal{R}^{-1}$

données par :

$$\mathcal{R}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0 & 0 & -\frac{\rho}{\gamma} \\ \frac{u}{a^2} & \rho & 0 & -\frac{\rho u}{\gamma} \\ \frac{v}{a^2} & 0 & \rho & -\frac{\rho v}{\gamma} \\ \frac{h_t}{a^2} & \rho u & \rho v & -\frac{\rho q^2}{2\gamma} \end{bmatrix} \ , \ \mathcal{R} = \begin{bmatrix} \frac{(\gamma-1)q^2}{2} & -u(\gamma-1) & -u(\gamma-1) & \gamma-1 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ -\frac{v}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 \\ \frac{(\gamma-1)q^2}{2p} - \frac{\gamma}{\rho} & -\frac{u(\gamma-1)}{p} & -\frac{v(\gamma-1)}{p} & \frac{(\gamma-1)}{p} \end{bmatrix}$$

Le préconditionneur en variables conservatives d'après la relation $\mathcal{T}_c = \mathcal{R}^{-1}\mathcal{T}\mathcal{R}$ s'écrit :

$$\mathcal{T}_c = \mathcal{I}d + (\beta^2 - 1)\frac{\gamma - 1}{a^2} \begin{bmatrix} \frac{q^2}{2} & -u & -v & 1 \\ \frac{q^2}{2}u & -u^2 & -uv & u \\ \frac{q^2}{2}v & -uv & -v^2 & v \\ \frac{q^2}{2}h_t & -uh_t & -vh_t & h_t \end{bmatrix}$$

la matrice $\mathcal{M}$ est donnée explicitement par :

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} \beta^2\mathcal{U} & \rho\beta^2 a^2 n_x & \rho\beta^2 a^2 n_x & 0 \\ \frac{n_x}{\rho} & \mathcal{U} & 0 & 0 \\ \frac{n_y}{\rho} & 0 & \mathcal{U} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathcal{U} \end{bmatrix}$$

Les cinq valeurs propres de $\mathcal{M}$ deviennent :

$$\begin{cases} \lambda = \mathcal{U} \\ \lambda = \mathcal{U} \\ \lambda = \frac{1}{2}\left((1+\beta^2)\mathcal{U}) + \sqrt{X}\right) \\ \lambda = \frac{1}{2}\left((1+\beta^2)\mathcal{U}) - \sqrt{X}\right) \end{cases}$$

avec $\left[(1-\beta^2)\mathcal{U})\right]^2 + 4\beta^2 a^2$. Les matrices des vecteurs propres à droite et à gauche sont :

$$\mathcal{N} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -n_y & -\frac{rn_x}{\rho\beta^2 a^2} & -\frac{sn_x}{\rho\beta^2 a^2} \\ 0 & n_x & -\frac{rn_y}{\rho\beta^2 a^2} & -\frac{sn_y}{\rho\beta^2 a^2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \mathcal{N}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -n_y & n_x & 0 \\ \frac{s}{2t} & -\frac{\rho\beta^2 a^2}{2t}n_x & -\frac{\rho\beta^2 a^2}{2t}n_y & 0 \\ \frac{r}{2t} & +\frac{\rho\beta^2 a^2}{2t}n_x & \frac{\rho\beta^2 a^2}{2t}n_y & 0 \end{bmatrix}$$

Finalement, les expressions de $\mathcal{M}^g$ et de $\mathcal{M}^d$ sont respectivement données par :

$$\mathcal{M}^g = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2\beta^2 a^2} & \frac{1}{2\beta^2 a^2} \\ u & n_y & \frac{u+rn_x}{2\beta^2 a^2} & \frac{u+sn_x}{2\beta^2 a^2} \\ v & -n_x & \frac{v+rn_y}{2\beta^2 a^2} & \frac{v+sn_y}{2\beta^2 a^2} \\ \frac{q^2}{2} & \mathcal{V} & \frac{h_t+r\mathcal{U}}{2\beta^2 a^2} & \frac{h_t+s\mathcal{U}}{2\beta^2 a^2} \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{M}^d = \begin{bmatrix} 1-\frac{(\gamma-1)}{a^2}\frac{q^2}{2} & \frac{\gamma-1}{a^2}u & \frac{\gamma-1}{a^2}v & -\frac{\gamma-1}{a^2} \\ \mathcal{V} & n_y & -n_x & 0 \\ \frac{s\ \frac{q^2}{2}(\gamma-1)+\beta^2a^2\mathcal{U}}{t} & -\frac{s\ u(\gamma-1)+\beta^2a^2n_x}{t} & \frac{s\ v(\gamma-1)+\beta^2a^2n_y}{t} & \frac{s\ (\gamma-1)}{t} \\ -\frac{r\ \frac{q^2}{2}(\gamma-1)+\beta^2a^2\mathcal{U}}{t} & \frac{r\ u(\gamma-1)+\beta^2a^2n_x}{t} & \frac{r\ v(\gamma-1)+\beta^2a^2n_y}{t} & -\frac{r\ (\gamma-1)}{t} \end{bmatrix}$$

où

$$\begin{aligned} r &= \lambda_3 - \mathcal{U}^2\beta^2 \quad , \quad s = \lambda_4 - \mathcal{U}^2\beta^2 \quad , \quad t = \frac{\lambda_4-\lambda_3}{2} \\ \mathcal{V} &= -un_y + vn_x \quad , \quad \mathcal{U} = un_x + vn_y \end{aligned}$$

Nous pouvons vérifier que dans le cas où le nombre de Mach est petit et si $\beta = 1$, on a : $r = a,\ \ s = -a,\ \ t = -a$. Par conséquent, les variables r, s et t sont bien de l'ordre de grandeur de la vitesse du son alors que si $\beta \sim M$, les variables r,s,et t sont de l'ordre de grandeur de la vitesse de l'écoulement. Dans le cas $\beta = 1$ on retrouve bien les matrices du schéma de *Roe*. Notons bien que cette méthode est appliquée afin de mener à bien nos simulations plus rapidement vers l'état stationnaire.

Extension à un ordre de précision spatiale supérieure : Méthodes à variation totale diminuante

Afin d'évaluer le flux numérique au premier ordre en espace, les valeurs $\mathbf{Q_{ij}}$ et $\mathbf{Q_{ji}}$ considérées de part et d'autre de l'interface Γ_{ij} entre deux volumes de contrôle $\mathcal{C}_i$ et $\mathcal{C}_j$ sont simplement les valeurs moyennes $\mathbf{Q_i}$ et $\mathbf{Q_j}$ sur ces volumes. L'erreur de troncature du schéma en $\mathcal{O}(\Delta x)$ est néanmoins une source trop importante de dissipation numérique. Pour augmenter la précision spatiale dans l'approximation du flux, les valeurs $\mathbf{Q_{ij}}$ et $\mathbf{Q_{ji}}$ prises en compte doivent être extrapolées linéairement à partir des valeurs moyennes et d'une estimation adéquate des gradients sur ces cellules adjacentes $\mathcal{C}_i$ et $\mathcal{C}_j$. Cependant, au second ordre, le schéma numérique devient consistant avec une équation de dispersion. La vitesse de propagation des ondes numériques peut ainsi varier en fonction de leur phase, ce qui induit l'apparition de trains d'ondes oscillantes. Pour empêcher l'apparition d'une telle solution non-physique, nous retenons, dans le cadre de cette étude, l'utilisation de méthodes TVD. Celles-ci consistent globalement à sélectionner ou limiter judicieusement les valeurs des gradients rencontrés de part et d'autre de l'interface, de façon à garantir la décroissance de l'ensemble des "pics" que la solution présente localement. Une estimation du nombre et de l'amplitude de ces pics est donnée par la variation totale, définie rigoureusement en une dimension d'espace par :

$$TV(\mathbf{Q}(t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\delta u(x,t)}{\delta x} \right| dx$$

Cette grandeur pourrait, en considérant dans notre cas la direction donnée par la normale moyenne à l'interface, être évaluée numériquement par :

$$TV(\mathbf{Q}^n) = \sum_{i}^{N_c} |\mathbf{Q}_{i+1} - \mathbf{Q}_i| \tag{4.35}$$

On notera bien qu'un tel schéma de discrétisation, monotone et conservatif, ne peut rigoureusement pas être d'un ordre supérieur à 1, de sorte que les méthodes TVD effectivement utilisées doivent nécessairement se baser sur une définition plus faible de la monotonie. On s'arrange en fait pour que la valeur mise à jour soit simplement incluse dans l'intervalle constitué par la plus petite valeur et la plus grande valeur des arguments de la fonction de flux numérique. Cette approche équivalente, dite de limitation de flux, est moins restrictive mais s'avère suffisante pour éliminer les oscillations non-physiques pouvant se propager et parfois conduire à la divergence du calcul. Finalement, l'application de cette méthode revient à ajouter au schéma numérique constitué au premier ordre un terme correcteur. Dans notre étude, nous avons retenu l'utilisation du limiteur *"minmod"* pour extrapoler les valeurs de part et d'autre de l'interface Γ_{ij} , introduit en une dimension d'espace par :

$$lim_{minmod}(a,b) = \frac{signe(a) + signe(b)}{2} min(|a|,|b|) \tag{4.36}$$

où a et b sont généralement les deux pentes évaluées (généralement en amont et en aval de l'interface) sur lesquelles la limitation s'applique. Pour l'approche éléments finis en configuration bidimensionnelle retenue, cette fonction de limitation est directement appliquée sur tous les gradients de chaque composante v_m rencontré sur l'ensemble des triangles participant à la construction des deux volumes de contrôle adjacents à l'interface considérée. Rappelons les notations classiques pour les fonctions min et max qui donnent respectivement la plus petite et la plus grande valeur de l'ensemble de valeurs auquel elles sont appliquées et la fonction $signe$ qui retourne la valeur -1 ou $+1$ si la valeur à laquelle elle est appliquée est respectivement négative ou positive . Par souci de simplification d'écriture, nous introduisons également les grandeurs suivantes :

$$\begin{cases} minx(v_m) = min\left(signe\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial x}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right)\right) \\ miny(v_m) = min\left(signe\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial y}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right)\right) \\ maxx(v_m) = max\left(signe\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial x}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right)\right) \\ maxy(v_m) = max\left(signe\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial y}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right)\right) \end{cases}$$

Nous pouvons alors formellement réexprimer le gradient limité utilisé pour la variable primitive v_m sous la forme suivante :

$$(\overrightarrow{\nabla} v_m)_{ij} = (\overrightarrow{\nabla} v_m)_{ji} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(minx(v_m) + maxx(v_m)).min\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial x}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right) \\ \frac{1}{2}(miny(v_m) + maxy(v_m)).min\left(\left(\frac{\partial v_m}{\partial y}\right)|_{T_k, k\in T_k^i \cup T_k^j}\right) \end{pmatrix}$$

Notons bien que le schéma qui en résulte est très diffusif dans la mesure où on retombera nécessairement à l'ordre 1 dès qu'un changement de signe des pentes sera détecté autour de Γ_{ij}.

Après différents tests préliminaires du solveur sur notre configuration, la robustesse du schéma qui en résulte s'est néanmoins révélée primordiale au cours des phases transitoires de calcul. A partir de cette estimation de pente $(\nabla v_m)_{ij}$ relative à chaque variable physique v_m, les états à gauche v_{mij} et à droite v_{mji} de l'interface sont finalement extrapolés selon :

$$\begin{cases} v_{mij} = v_{mi} + \frac{1}{2}(\nabla v_m)_{ij} \cdot ij \\ v_{mji} = v_{mj} - \frac{1}{2}(\nabla v_m)_{ji} \cdot ij \end{cases}$$

où les gradients $(\nabla v_m)_{ij}$ et $(\nabla v_m)_{ji}$ sont estimés en fonction de la limitation "minmod" et où ij correspond à la distance entre les noeuds i et j. La reconstruction des états conservatifs à gauche $\mathbf{Q}_{ij}$ et à droit $\mathbf{Q}_{ji}$ est alors immédiate. Ainsi, nous pouvons simplement évaluer le flux numérique au second ordre en espace en appliquant les expressions du flux de Roe à ces deux états conservatifs extrapolés à l'interface au lieu des états moyens $\mathbf{Q}_i$ et $\mathbf{Q}_j$.

4.1.5 Évaluation des flux diffusifs et des termes sources

Par application des formules de Green, l'intégrale de volume, sur un volume de contrôle $\mathcal{C}_i$ de la divergence des flux visqueux ou turbulents, pondérée (en formulation faible Galerkin) par la fonction test f peut se réexprimer selon :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{C}_i} \nabla \cdot \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot f dV &= \int_{\Gamma_i} \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot f \mathbf{n}_i dS - \int_{\mathcal{C}_i} \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot \nabla f dV \\ &= \sum_{k \in T_k^i} \left[\int_{\Gamma_{ij}} \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot N_i \mathbf{n}_i dS - \int_{C_i \cap T_k^i} \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot \nabla N_i dV \right] \end{aligned} \tag{4.37}$$

en choisissant, sur chaque triangle T_k, la fonction de base élément $\mathcal{P}_1$ N_i associée au noeud i.

De par le choix de la forme des volumes de contrôle à l'intérieur du domaine de calcul et des fonctions test linéaires sur chaque élément triangulaire intersectant le volume de contrôle, cette intégration se ramène en fait simplement à :

$$-\sum_{k \in T_k^i} \int_{T_k} \mathbf{d}(\mathbf{q}^h) \cdot \nabla N_i dV$$

Les gradients de variables physiques intervenant dans l'expression des flux visqueux ou turbulents sont alors eux-même évalués en se ramenant à l'évaluation des gradients des fonctions tests éléments P1 (voir annexe C), tandis que les coefficients de diffusion sont pris constants et égaux, sur chaque élément triangulaire T_k, à la moyenne des coefficients donnés aux noeuds de ce triangle. Par exemple, le flux conductif de chaleur est évalué sur un des triangles T_k intersectant le volume de contrôle $\mathcal{C}_i$ selon :

$$\lambda \nabla(T) = \frac{1}{3} \left(\sum_{j \in \mathcal{S}(T_{k_i})} \lambda_j \right) \sum_{j \in \mathcal{S}(T_{k_i})} T_j \nabla N_{jk} \nabla N_{ik}$$

Les fonctions d'interpolation étant linéaires, les composantes des gradients des fonctions de base sont constantes. L'intégration sur le volume revient ainsi rigourement à mutiplier les produits de gradients des fonctions de base par le volume V_{T_k} des triangles T_k participant à la construction de la cellule, soit par exemple pour l'intégration du flux conductif de chaleur :

$$\int_{\mathcal{C}_i} \lambda \nabla(T) dV = \sum_{k \in T_{k_i}} V_{T_k} \left[\frac{1}{3} \left(\sum_{j \in \mathcal{S}(T_{k_i})} \lambda_j \right) \sum_{j \in \mathcal{S}(T_{k_i})} T_j \nabla N_{jk} \nabla N_{ik} \right]$$

Le tenseur des déformations intervenant dans l'expression des contraintes laminaires ou turbulentes s'évalue de façon similaire en remplaçant le champ scalaire de température par les composantes du champ de vitesse, et le champ de conductivité par le champ de viscosité laminaire ou du coefficient de viscosité turbulente. Finalement, il en est de même pour les termes sources qui font intervenir des gradients à intégrer sur chaque volume.

4.1.6 Discrétisation temporelle et implicitation

Dans l'intérêt principal de décrire l'état stationnaire des écoulements étudiés dans le cadre de notre travail, nous utilisons une formulation implicite qui est résolue itérativement (méthode de Gauss-Seidel ou Jacobi). Nous avons retenu la méthode d'intégration en temps implicite au premier ordre implantée dans N3SNatur. L'avancement en temps est réalisé successivement pour les variables hydrodynamiques et puis pour les autres variables convectées par l'écoulement.

Le schéma numérique implicite d'ordre un en espace s'écrit :

$$V_{\mathcal{C}_i} \mathbf{Q}_i^{(n+1)} - V_{\mathcal{C}_i} \mathbf{Q}_i^{(n)} = - \sum_{k \in T_k^i} \mathbf{F}_{ij}^{(n+1)} - \int_{\Gamma_i \cap \Omega} \mathbf{F}_B^{(n+1)} dS - \sum_{T_k \in \mathcal{T}_h} V_{T_k} \Delta t \mathbf{D}_{T_k,i}^{(n+1)} + (\mathcal{TB})_\Omega^{(n+1)} \quad (4.38)$$

L'essentiel de la méthode consiste alors à linéariser les différents termes de flux présents dans cette relation à partir des flux explicites. Le flux convectif des variables hydrodynamiques à l'instant t^{n+1} s'écrit ainsi :

$$\mathbf{F}_{ij}^{(n+1)} = \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{Q}_i^{(n+1)}, \mathbf{Q}_j^{(n+1)})$$

En linéarisant à l'ordre un en temps, celui-ci peut se réécrire selon :

$$\mathbf{F}_{ij}^{(n+1)} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}_i^{(n)}, \mathbf{Q}_j^{(n)}) + \mathcal{H}_1(\mathbf{Q}_i^{(n)}, \mathbf{Q}_j^{(n)}) \Delta \mathbf{Q}_i^{(n+1)} + \mathcal{H}_2(\mathbf{Q}_i^{(n)}, \mathbf{Q}_j^{(n)}) \Delta \mathbf{Q}_j^{(n+1)}$$

où

$$\Delta \mathbf{Q}_i^{(n+1)} = \mathbf{Q}_i^{(n+1)} - \mathbf{Q}_i^{(n)}$$

et où $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$ sont les matrices jacobiennes issues de la linéarisation de Roe (version préconditionnée de l'expression 4.29).

Étant donné que le schéma implicite linérisé ne peut assurer le principe du maximum pour les variables convectées, le flux de ces variables est alors totalement explicité selon :

$$(\mathbf{F}_{ij}^{\rho\ \Theta})^{(n+1)} = (\mathbf{F}_{ij}^{\rho})^{(n+1)} \times \begin{cases} \Theta_i^{n+1} & si\ \ \mathbf{F}_{ij}^{\rho} > 0 \\ \Theta_j^{n+1} & sinon \end{cases} \tag{4.39}$$

où $(\mathbf{F}_{ij}^{\rho})^{(n+1)}$ est le flux implicite linéarisé relatif à la masse volumique et Θ la variable convectée.

Les flux diffusifs présents dans l'expression (4.38) sont également traités séparément pour les variables hydrodynamiques et turbulentes. Une démarche similaire à celle adoptée pour les flux convectifs nous conduit à :

$$\mathbf{D}_{T_k,i}^{(n+1)} = \mathbf{D}_{T_k,i}^{(n)} + \left(\frac{\partial \mathbf{D}_{T_k,i}}{\partial \mathbf{Q}_i}\right) \Delta \mathbf{Q}_i^{(n)} + \sum_{k_i \in T, k_i \neq i} \left(\frac{\partial \mathbf{D}_{T_k,i}}{\partial \mathbf{Q}_{k_i}}\right) \Delta \mathbf{Q}_i^{(n)} \tag{4.40}$$

où

$$\mathbf{D}_{T_k,i}^{(n)} = \sum_{j=1}^{2} \mathcal{S}_j(\mathbf{Q}) \mid_T \left(\frac{\partial \mathbf{Q}_i^T}{\partial x_j}\right)$$

où l'index $k_i = 1 - 3$ dans l'expression (4.40) parcourt les trois sommets du triangle. À la différence des termes convectifs, aucune simplification n'est nécessaire pour cette linéarisation car les matrices jacobiennes $\frac{\partial \mathcal{S}_j(\mathbf{Q})|_T}{\partial \mathbf{Q}_{k_i}}$ relatives à $\mathcal{S}_j(\mathbf{Q})$ sont alors calculées de façon exacte[6].

La linéarisation du terme source s'écrit[7] :

$$\mathbf{S}(\mathbf{Q}_T^{(n+1)}) = \mathbf{S}(\mathbf{Q}_T^{(n)}) + \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{Q}_T} \left(\mathbf{Q}_T^{(n+1)} - \mathbf{Q}_T^{(n)}\right)$$

Finalement, les termes de bord qui apparaissent dans l'expression 4.38 et qui résultent de la prise en compte des conditions limites (voir § 4.1.7), sont également linéarisés selon :

Après la linéarisation les termes de bord s'écrivent :

$$\oint_{\Gamma \cap \Omega} \mathbf{F}^{(n+1)} \left(\mathbf{Q}_i, \eta_i\right)\ dS = \oint_{\Gamma \cap \Omega} \mathbf{F}^{(n)} \left(\mathbf{Q}, \eta\right)\ dS + \oint_{\Gamma \cap \Omega} \frac{\partial \mathbf{F}^{(n)} \left(\mathbf{Q}, \eta\right)}{\partial \mathbf{Q}}\ dS \tag{4.41}$$

Le détail du calcul de la matrice jacobienne de flux $\frac{\partial \mathbf{F}^{(n)}(\mathbf{Q},\eta)}{\partial \mathbf{Q}}$ peut notamment être consulté dans la référence [70].

4.1.7 Conditions aux limites

Les équations de bilan développées précédemment, sont valables dans tout l'espace du domaine de calcul. Cependant, leur résolution requiert la prise en compte des effets du reste de l'écoulement non simulé à travers les frontières du domaine. Dans la configuration d'écoulement considérée dans notre étude, aucune condition de symétrie ou de périodicité ne peut être utilisée pour réduire l'extension de la géométrie du domaine et donc le coût calcul. Une certaine quantité d'information physique doit donc être introduite à travers chaque frontière. Notons

[6] Les détails de ce calcul peuvent être consultés dans [69]

[7] Les détails de ce calcul peuvent également être consultés dans [69]

que si la prescription parfaite de cette information physique reste irréalisable, elle doit avant tout introduire une perturbation minimale dans l'écoulement effectivement simulé et donc rester compatible avec la précision et la stabilité du schéma numérique. Une des principales caractéristiques des écoulements simulés en régime compressible repose sur le caractère propagatif de l'information dans les directions caractéristiques locales. Ceci nous amène à devoir distinguer les conditions physiques qui doivent alors être effectivement prescrites pour un nombre requis de variables physiques des conditions purement numériques, simplement requises par l'algorithme numérique. Dans le cadre de la formulation mixte volumes finis / éléments finis que nous avons suivie, nous avons adopté l'approche qui repose sur la théorie caractéristique en une dimension d'espace. Une fois ces conditions déterminées, il est alors possible de les imposer, soit de manière forte (on parle de conditions de Dirichlet), en imposant la valeur des variables physiques ou conservatives directement aux noeuds de la frontière, soit de manière faible (conditions de type Neuman), en imposant ces valeurs dans l'expression des composantes des flux de bords relatifs aux facettes appartenant à ces frontières, soit de manière mixte. L'imposition de ces conditions physiques dans l'expression des composantes des flux doit permettre de retrouver, à la convergence, les niveaux attendus pour l'ensemble de toutes les autres variables physiques aux noeuds des frontières du calcul mais, introduit une liberté dans les niveaux des variables accessibles dans la phase transitoire de calcul, ce qui peut conduire à la dérive de ces conditions et donc à la divergence du calcul. Elle reste néanmoins plus naturelle dans le cadre de la méthode des volumes finis et de l'approche de la résolution du problème de Riemann retenues. Nous la retenons donc dans la mesure où la robustesse du schéma résultant n'est pas mise en défaut pour la majorité de nos cas de simulation. Dans la suite de cette section, nous précisons pour chaque frontière comment ces conditions sont effectivement traitées.

Les frontières libres

La méthodologie retenue repose sur la théorie caractéristique en une dimension d'espace en considérant la direction normale moyenne aux frontières. On suppose donc implicitement que les effets visqueux et turbulents sont négligeables par rapport aux termes convectifs sur les frontières d'entrée des canaux d'alimentation et sur celles de la sortie de l'élargissement. Les états à ces frontières étant subsoniques, la théorie nous indique alors qu'il nous est nécessaire de prescrire :

- 3 variables hydrodynamiques pour l'entrée,
- 1 variable hydrodynamique pour la sortie.

Prescription des conditions à l'entrée Pour les variables à l'entrée, nous choisissons la pression, la température et la vitesse longitudinale qui sont prescrites dans les composantes du flux. La vitesse tangentielle est alors recalculée de façon à ce que le débit moyen soit conservé. Les variables turbulentes et les fractions massiques d'espèces sont par ailleurs prescrites faiblement.

Le rôle de la diffusion turbulente tangentielle étant prépondérant pour les écoulements issus de canaux, la prescription d'un profil inexact des variables turbulentes en entrée pourrait conduire à une modification non-négligeable de la structure de l'écoulement attendu dans le domaine. Aussi, nous choisissons de réaliser séparément une étude de l'écoulement turbulent développé de canal plan afin d'extraire des profils numériques de ces variables les plus représentatifs et de les prescrire en entrée.

Prescription des conditions à la sortie La structure du problème de Riemann simplifié qui est considéré à ce niveau est similaire à celui considéré pour le schéma de Roe et consiste à connecter l'état à la frontière $\mathbf{Q}_i$ à celui à sa droite l'état limite $\mathbf{Q}_l$ en utilisant l'hypothèse de raccordement par une onde de compression ou de détente isentropique (expression 4.42). La pression est choisie comme variable hydrodynamique physique à réimposer au niveau de la sortie. Elle est déterminée en supposant que l'écoulement est suffisamment développé pour être structurellement similaire à un canal turbulent pleinement développé et que la pression effective $\bar{p} + \frac{2}{3}\bar{\rho}k$ est constante dans le plan de sortie. L'énergie cinétique de la turbulence s'annulant à la paroi, nous avons alors accès, à chaque instant de la simulation, à la valeur de cette pression effective qui est égale à la pression statique à la paroi qui est fixée. Le profil de pression statique $\bar{p}_l$ prescrit à droite des interfaces de sortie est alors calculé de façon à conserver ce niveau déterminé de la pression effective. La méthodologie suivie consiste alors à construire et extrapoler l'ensemble des variables de l'état fictif à droite des frontières de sortie. Ceci permet alors de recalculer de façon naturelle le flux au niveau de l'interface par décentrage. Cette transformation s'effectuant à entropie constante (expression 4.43).

$$\bar{p}_l - \bar{p}_i = -\bar{\rho}_i a_i (\tilde{v}_{nl} - \tilde{v}_{ni}) \tag{4.42}$$

$$\bar{p}_l - \bar{p}_i = (\bar{\rho}_l - \bar{\rho}_i) a_i^2 \tag{4.43}$$

où a_i est la vitesse du son, on en déduit successivement la vitesse normale $\bar{v}_{nl}$ de l'état $\mathbf{Q}_l$, puis sa masse volumique $\bar{\rho}_l$.

Les parois solides

Dans un écoulement turbulent et confiné, la prise en compte des effets de couche limite est problématique. La paroi bloque l'écoulement et l'énergie des fluctuations normales est redistribuée sur les composantes tangentielles (Chassaing [16]). De plus, une forte variation du cisaillement moyen crée une direction privilégiée, de sorte que l'écoulement devient fortement inhomogène. Les effets cinématiques qui prédominent sur le comportement du champ turbulent et la distribution des corrélations inconnues changent considérablement. Les modélisations faites à grand nombre de Reynolds perdent ainsi leur validité à proximité de la paroi. Pour cela nous disposons de deux options. Nous pouvons tout d'abord intégrer les équations jusqu'à la paroi en

introduisant des corrections dites "bas Reynolds" telles que celles relatives au modèle de *Chien* [17]. Un tel choix s'avérant relativement coûteux, nous ne l'utilisons que pour simuler l'écoulement de canal plan. Nous pouvons ensuite ne résoudre que la zone extérieure de la couche limite en intégrant les effets de celle-ci sur l'écoulement par des lois de paroi (fondées sur l'hypothèse d'équilibre local dans la zone logarithmique).

Les lois de paroi

L'utilisation de lois de paroi permet de s'affranchir de la description de la sous-couche visqueuse qui pénalise le coût du calcul par une discrétisation spatiale très importante. L'écoulement interne n'est effectivement calculé que jusqu'à une frontière fictive située à une distance δ de la paroi localisée au niveau de la zone logarithmique de la couche limite. Les contraintes pariétales et le flux de chaleur induit par la présence de cette couche limite doivent alors être prescrits dans les composantes du flux de bord à travers cette frontière fictive. A partir de la vitesse de frottement $U_f = \sqrt{\frac{\tau_p}{\rho}}$, où τ_p est la contrainte pariétale (imposée par la paroi sur les lignes fluides de l'écoulement à sa proximité), on introduit classiquement la distance adimensionnée à la paroi $y^+ = \frac{\rho U_f \delta}{\mu}$. On doit alors en toute rigueur imposer les points de la frontière du domaine de calcul à une distance physique permettant de se positionner dans la partie haute de la zone logarithmique, soit typiquement dans la plage $50 < y^+ < 300$. A partir de la masse volumique locale ρ, d'une distance physique δ, de la viscosité locale μ, la prescription d'une loi analytique décrivant l'évolution de la vitesse de frottement en fonction de y^+ permet alors de se redonner une vitesse de frottement à la frontière. Celle-ci est déterminée itérativement à partir d'une vitesse de frottement initialisée à la vitesse tangentielle de l'écoulement à la paroi. De cette vitesse de frottement découlent alors la contrainte pariétale et la température de frottement T_f selon la loi d'Arpaci et Larsen [70] :

$$\frac{T_p - T(y=\delta)}{T_f} = \frac{Pr_t}{K}\left(log\left(\frac{PrK}{Pr_t}y^+\right) + 1\right)$$

L'assemblage des flux visqueux est alors réalisé avec la connaissance de la vitesse de frottement donnée par les lois de paroi. Les flux de contrainte et de chaleur sont imposés finalement sur les composantes du flux de bord F_B selon :

$$F_B = \delta t \begin{pmatrix} 0 \\ p_i\overrightarrow{n_i} - \tau_p\overrightarrow{t_i} \\ -\tau_p\overrightarrow{U_i}.\overrightarrow{t_i} + T_f U_\tau \end{pmatrix}$$

Dans le cas adiabatique, le flux de chaleur vient compenser la dissipation turbulente, et, comme le gradient de k est nul, il ne reste qu'une composante dans l'expression du flux visqueux. Au voisinage de la paroi, cette contrainte s'écrit sous la forme $\tau_p = \rho u_\tau^2$ (voir § 3.1.5).

Par ailleurs, l'hypothèse d'égalité entre la production et la dissipation (observée expérimentalement et par les simulations directes), dans la zone de transition de la couche limite permet

d'estimer les expressions de k et ϵ en fonction de U_f, soit :

$$\begin{cases} k = \frac{U_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \\ \epsilon = \frac{U_\tau^3}{K\delta} \end{cases}$$

Ces valeurs de k et ϵ sont quant à elles fixées fortement aux noeuds du domaine appartenant à la frontière.

4.1.8 La convergence et le résidu

L'estimation de l'évolution de la convergence est basée sur le niveau de décroissance du résidu initial d'une grandeur caractéristique de l'écoulement, soit la vitesse dans notre cas. Nous estimons que le calcul est convergé lorsque la décroissance du résidu est de cinq à six ordres de grandeur par rapport à son niveau initial. Le calcul du résidu pour chaque grandeur se base sur la norme L_2[8] des écarts enregistrés en chaque noeud entre deux pas de temps, normalisée par sa valeur initiale. Pour le cas de la masse volumique ρ, l'expression effectivement utilisée est la suivante :

$$\mathcal{R}_\rho = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\rho^{n+1}-\rho^n\right)\frac{V_i}{\Delta t}\right]^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\rho^{1}-\rho^0\right)\frac{\mathcal{V}_\rangle}{\Delta t}\right]^2}} \tag{4.44}$$

Pour évaluer le résidu sur les composantes de la vitesse on applique l'expression suivante :

$$\mathcal{R}_\phi = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\phi^{n+1}}{\rho^{n+1}}-\frac{\phi^n}{\rho^n}\right)\frac{V_i}{\Delta t}\right]^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\phi^{1}}{\rho^{1}}-\frac{\phi^0}{\rho^0}\right)\frac{V_i}{\Delta t}\right]^2}} \tag{4.45}$$

où la variable ϕ correspond aux composantes de la quantité de mouvement, soit ρu ou ρV respectivement. Pour le résidu de l'énergie totale $\mathcal{E}$, des fractions massiques des espèces chimiques Y_α, de l'énergie cinétique turbulente k et de son taux de dissipation ε, le choix retenu dans N3SNatur est d'utiliser le carré de la norme L_2, soit :

$$\mathcal{R}_\Psi = \frac{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\phi^{n+1}}{\rho^{n+1}}-\frac{\phi^n}{\rho^n}\right)\frac{V_i}{\Delta t}\right]^2}{\sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\phi^{1}}{\rho^{1}}-\frac{\phi^0}{\rho^0}\right)\frac{V_i}{\Delta t}\right]^2} \tag{4.46}$$

où de la même façon la variable ϕ correspond aux autres variables conservatives, soit $\rho\mathcal{E}$, ρY_α, ρk ou $\rho\varepsilon$ respectivement.

Dans les expressions 4.44, 4.45 et 4.46, N représente le nombre totale de nœuds dans le domaine de calcul, n représente l'indice de l'itération en cours, V_i est la surface du volume de contrôle C_i et Δt, représente le pas de temps par noeud.

[8] Norme $L_2 \equiv \sqrt{\sum_i^n \Psi_i^2}$d'une grandeur Ψ quelconque

4.2 Programme JASON2D : Méthode des différences finies avec une approche de type compressibilité artificielle

Nous avons utilisé ce programme de calcul en différences finies qui a été initialement développé dans une version compressible par Bruel [11] , puis dans une version "Mach zéro" basée sur la méthode de compressibilité artificielle, à masse volumique variable par Bruel et al. [12]. C'est cette dernière version du programme que nous utiliserons, à masse volumique constante, afin de pouvoir calculer un écoulement bidimensionnel de canal turbulent pleinement développé avec le modèle de turbulence à bas nombre de Reynolds de Chien [17] et ce, afin de choisir de manière optimale les caractéristiques des maillages en proche paroi pour les calculs sur ORACLES avec N3SNatur qui utilise une loi de paroi en proche paroi. Nous présentons rapidement ci-après la méthode numérique sur laquelle repose ce programme.

Concept de compressiblité artificielle

A partir de la forme originale proposée par Chorin [19], de nombreux auteurs ont utilisé et développé cette approche adaptée aux écoulements incompressibles ou dilatables, que ce soit pour l'étude des écoulements inertes stationnaires et instationnaires (citons entre autres, Peyret [58], Choi et Merkle [18], Soh et Goodrich [72], Rogers et Kwak [67], McHugh et Ramshaw [53] ou pour les écoulements réactifs stationnaires (Bruel et al. [13], Karmed et al. [42]) ou instationnaires (Corvellec et al. [23], Dourado et al. [25]). Le principe de la méthode de compressibilité artificielle est simple. Il consiste à ajouter des termes pseudo-instationnaires de relaxation aux équations stationnaires initiales et en particulier, un terme de pression instationnaire dans l'équation de continuité. Le système d'équations devient alors hyperbolique et l'information se propage à travers tout le domaine de calcul avec une pseudo-vitesse du son finie. Dans le cas d'un écoulement moyen stationnaire, l'équation de continuité, qui devient *de facto* l'équation pour la pression, s'écrit alors :

$$\frac{1}{\beta^{ac}}\frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0$$

où τ est le pseudo-temps sur lequel le cycle d'itérations va porter et β^{ac}, le coefficient de compressibilité artificielle qui s'exprime en m^2/s^2. L'étude des valeurs propres de la matrice associée aux flux convectifs, par exemple dans la direction ox_i, fait alors apparaitre le terme $(\beta^{ac} + \tilde{u}_i^2)^{\frac{1}{2}}$ comme jouant le même "rôle" que la vitesse du son réelle pour un écoulement compressible. Numériquement, cette pseudo-vitesse du son distribue l'information de pression statique dans tout le domaine de calcul, les états intermédiaires n'ayant aucune signification physique. L'évolution en fonction du pseudo-temps τ doit donc être considérée comme une relaxation du champ initial vers la solution physiquement significative donc en particulier lorsque $\frac{1}{\beta}\frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau} \rightarrow 0$. Soh [71] a montré que la détermination de la valeur optimale de β^{ac} pouvait être facilitée en considérant

un coefficient de compressibilité artificielle sans dimension tel que :

$$\hat{\beta}^{ac} = \frac{\beta^{ac}}{u_{ref}^2} \tag{4.47}$$

où la vitesse de référence est à choisir en fonction de l'écoulement considéré. Une valeur de $\hat{\beta}^{ac}$ comprise entre 5 et 10 correspond alors à un choix raisonnable.

Méthode de résolution des équations de bilan

L'ensemble des équations moyennes bidimensionnelles sont écrites dans un système de coordonnées quelconque (ξ, η) sous la forme pseudo-conservative suivante :

$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial t} + \frac{\partial(\hat{F}_i - \hat{F}_v)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\hat{G}_i - \hat{G}_v)}{\partial \eta} = \hat{S}$$

avec

$$\hat{q} = J^{-1} \begin{bmatrix} \bar{p} \\ \bar{\rho}\tilde{u} \\ \bar{\rho}\tilde{v} \\ \bar{\rho}k \\ \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \end{bmatrix}$$

où J, qui désigne le jacobien de la transformation de maillage entre l'espace physique muni d'un repère cartésien (o, x, y) et l'espace de calcul muni d'un repère (o, ξ, η), est défini par :

$$J = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x$$

Les pseudo-vecteurs $\hat{F}_i$, $\hat{G}_i$, $\hat{F}_v$, $\hat{G}_v$ et $\hat{S}$ sont alors définis par :

$$\hat{F}_i = \frac{(\xi_x F_i + \xi_y G_i)}{J}; \hat{G}_i = \frac{(\eta_x F_i + \eta_y G_i)}{J}$$
$$\hat{F}_v = \frac{(\xi_x F_v + \xi_y G_v)}{J}; \hat{G}_v = \frac{(\eta_x F_v + \eta_y G_v)}{J}$$

avec

$$F_i = \begin{bmatrix} \beta\bar{\rho}\tilde{u} \\ \bar{\rho}\tilde{u}^2 + \bar{p} + \frac{2}{3}\bar{\rho}k \\ \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{v} \\ \bar{\rho}\tilde{u}k \\ \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\varepsilon} \end{bmatrix} \qquad G_i = \begin{bmatrix} \beta\bar{\rho}\tilde{v} \\ \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{v} \\ \bar{\rho}\tilde{v}^2 + \bar{p} + \frac{2}{3}\bar{\rho}k \\ \bar{\rho}\tilde{v}k \\ \bar{\rho}\tilde{v}\tilde{\varepsilon} \end{bmatrix}$$

et

$$F_v = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{4}{3}(\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{2}{3}(\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \\ (\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + (\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \\ (\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x} \\ (\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_{\tilde{\varepsilon}}})\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x} \end{bmatrix} \qquad G_v = \begin{bmatrix} 0 \\ (\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + (\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \\ \frac{4}{3}(\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \frac{2}{3}(\mu+\mu_t)\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \\ (\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial y} \\ (\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_{\tilde{\varepsilon}}})\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial y} \end{bmatrix}$$

$$\hat{S} = J^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ S_k \\ S_{\tilde{\varepsilon}} \end{bmatrix}$$

Les termes sources sont associés uniquement au modèle de turbulence choisi, et s'écrivent donc, pour le modèle de Chien retenu et décrit au chapitre précédent, sous la forme :

$$S_k = P_k - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} - 2\mu\frac{k}{\delta^2}$$

et

$$S_{\tilde{\varepsilon}} = C_{\varepsilon_1} f_1 \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} P_k - C_{\varepsilon_2} f_2 \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k} - 2\mu\frac{\tilde{\varepsilon}}{\delta^2} e^{-0,5\delta^+}$$

avec, pour un écoulement à masse volumique constante :

$$P_k = \frac{4}{3}\mu_t\left(\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y}\right)^2 - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y}\right) + \mu_t\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x}\right)^2$$

Les diverses fonctions et constantes du modèle ont été précisées au chapitre précédent et ne sont pas rappelées ici. Dans les expressions précédentes de F_v ou G_v, les termes de la forme $\frac{\partial}{\partial x}$ ou $\frac{\partial}{\partial y}$ s'expriment également dans le système de coordonnées (ξ, η) par :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \eta}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \xi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \eta}$$

Les dérivées spatiales dans l'espace de calcul sont discrétisées en utilisant les formules centrées classiques précises à l'ordre 2, soit par exemple pour une grandeur Φ quelconque :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = \frac{\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j-1}}{2\Delta\eta} + O(\Delta\eta^2)$$

En utilisant une procédure de calcul dont une description détaillée est donnée par Bruel [11] et qui reprend les idées développées par Beam et al. [3] et Briley et al. [9], les équations précédentes sont résolues au cours des trois étapes suivantes, permettant d'obtenir la solution pour l'itération $\nu + 1$ à partir de celle connue à l'itération ν :

$$(I. + \Delta t(\delta_\xi(\hat{A}^\nu. - J^{-1}\hat{M}^\nu.) - \hat{P}^\nu.))\Delta\hat{q}^* = MDD^\nu \tag{4.48}$$

$$(I. + \Delta t\delta_\eta(\hat{B}^\nu. - J^{-1}\hat{N}^\nu.)\Delta\hat{q}^\nu = \Delta\hat{q}^*$$

$$\hat{q}^{\nu+1} = \hat{q}^\nu + \Delta\hat{q}^\nu$$

Dans le système précédent, le symbôle . indique que le produit matriciel doit être effectué avant que les opérateurs de discrétisation δ_η et δ_ξ correspondant aux dérivées partielles $\frac{\partial}{\partial\eta}$ et $\frac{\partial}{\partial\xi}$ ne soient appliqués. Chacune des deux opérations de balayage en ξ et en η entraine la résolution d'un système tridiagonal par bloc qui est réalisée par une méthode de type LU. L'équation d'état se réduit, dans le cadre de nos calculs utilisant ce programme à $\bar{\rho} = cste$.

Les matrices carrées 5x5 jacobiennes $\hat{A}^\nu$, $\hat{B}^\nu$ sont définies par :

$$\hat{A}^\nu = \left(\frac{\partial\hat{F}_i}{\partial\hat{q}}\right)^\nu$$

$$\hat{B}^\nu = \left(\frac{\partial\hat{G}_i}{\partial\hat{q}}\right)^\nu$$

alors que les matrices $\hat{M}^\nu$ et $\hat{N}^\nu$ correspondent au traitement implicite, à la façon de Steger et al.[73], de tous les termes de $\hat{F}_v$ et $\hat{G}_v$ qui contiennent des expressions de la forme

$$\frac{\partial}{\partial\xi}(\alpha_i\frac{\partial\hat{q}_i}{\partial\xi})$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial\eta}(\alpha_i\frac{\partial\hat{q}_i}{\partial\eta})$$

les autres termes de diffusion étant traités explicitement. La matrice $\hat{P}^n$ correspond au traitement implicite des termes sources négatifs, soit :

$$\hat{P}^\nu = \left(\frac{\partial\hat{S}_{imp}}{\partial\hat{q}}\right)^\nu$$

avec

$$\hat{S}_{imp} = J^{-1}\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\bar{\rho}\tilde{\varepsilon} - 2\mu\frac{k}{\delta^2} \\ -C_{\varepsilon_2}f_2\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{k} - 2\mu\frac{\tilde{\varepsilon}}{\delta^2}e^{-0.5\delta^+} \end{bmatrix}$$

le terme $\hat{S} - \hat{S}_{imp}$ restant étant quant à lui traité explicitement. Le membre de droite MDD^ν du système 4.48 contient quant à lui les équations discrétisées à l'itération ν soit :

$$MDD^{\nu} = \Delta t(\hat{S}^{\nu} - \delta_{\xi}(\hat{F}_i - \hat{F}_v)^{\nu} - \delta_{\eta}(\hat{G}_i - \hat{G}_v)^{\nu})$$

Lorsque le processus itératif converge, l'état stationnaire se caractérise par $MDD^{\nu} = 0$. Le maillage transformé est généré par un mailleur spécifiquement développé sur la base de la procédure décrite par Vinokur [80] et qui permet de générer un maillage 2D comportant éventuellement plusieurs zones de raffinement différentes tout en évitant les variations trop brutales des caractéristiques du maillage au niveau des domaines de raccordement spatial entre les diverses zones. Précisons enfin pour terminer, que ce programme est écrit en Fortran 77.

Nous achevons ici la présentation de l'ensemble des outils utilisés dans le cadre de notre travail et nous pouvons maintenant passer à la présentation des résultats que nous avons obtenus grâce à leur emploi. Nous commencerons par une présentation des paramètres caractérisant les divers écoulements simulés en insistant tout d'abord sur la prescription des conditions limites à l'entrée des canaux d'alimentation, puis dans le chapitre suivant nous présenterons les résultats obtenus en ce qui concerne la simulation des écoulements inertes, avant de passer à l'exposé des résultats obtenus pour les écoulements réactifs, à richesse constante ou présentant une différence de richesse entre les deux écoulements d'alimentation.

Deuxième partie

Étude numérique : simulation des écoulements inertes et réactifs stabilisés par un élargissement brusque symétrique

Chapitre 5

Choix de maillages adaptés et génération des conditions aux limites d'entrée

5.1 Positionnement des frontières du domaine de calcul par rapport aux parois solides

La figure 5.1 présente une vue d'ensemble du positionnement par rapport aux frontières géométriques du banc ORACLES de la frontière du domaine de calcul utilisé pour les simulations avec N3SNatur. Compte-tenu du recours à des lois de paroi au voisinage de toutes les parois solides, il est ainsi nécessaire de se fixer la distance δ à la paroi à laquelle se situe toute frontière du domaine de calcul proche d'une paroi solide.

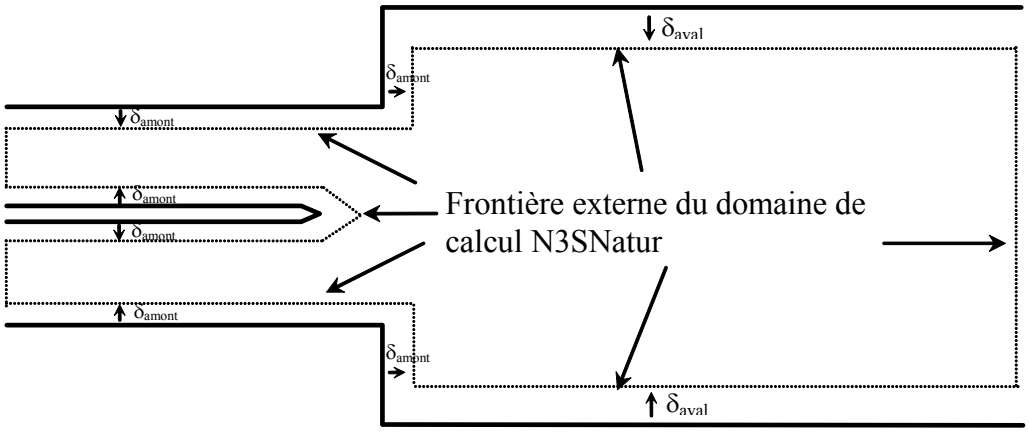

FIG. 5.1 – Calculs N3SNatur sur ORACLES : vue d'ensemble du domaine de calcul.

A priori, toutes les distances δ sont différentes puisque qu'elles doivent être choisies de ma-

nière à faire "fonctionner" localement la loi de paroi dans des conditions optimales. Idéalement, cette distance doit en particulier être choisie de manière à assurer que, localement, l'énergie cinétique de la turbulence k_δ sur cette frontière soit telle que $k_\delta = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}$. Afin de simplifier le processus de génération du maillage, nous avons choisi de ne considérer que deux distances possibles entre la frontière du domaine de calcul et les parois solides, distances que nous dénoterons respectivement par δ_{amont} pour toutes les frontières avec des parois solides au niveau des canaux d'alimentation et des parois verticales de l'élargissement brusque et δ_{aval} pour les parois horizontales de la veine d'essai (Figure 5.1). Nous retiendrons de plus, à débit global d'alimentation identique, la même valeur de δ_{aval} pour les écoulements inertes et réactifs que nous simulerons avec N3SNatur. Il nous faut donc maintenant déterminer δ_{amont} et δ_{aval} pour chaque configuration d'écoulement considérée. Le protocole que nous avons retenu consiste à déterminer ces distances sur des écoulements de canal turbulents pleinement développés et à utiliser ensuite ces dernières pour nos simulations sur ORACLES.

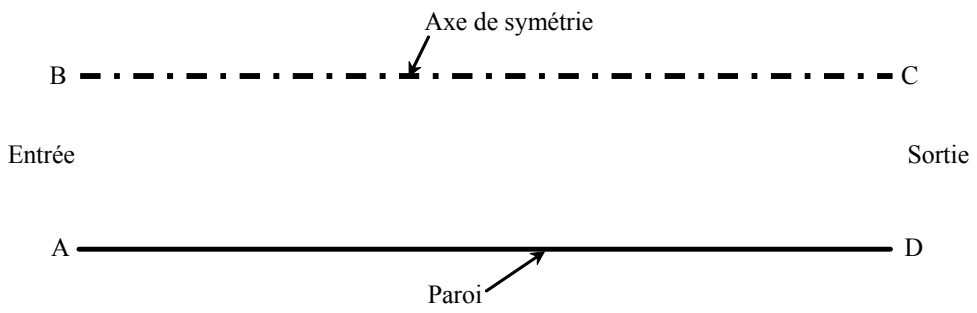

FIG. 5.2 – Calculs Jason2D d'écoulements de canal turbulent : domaine de calcul considéré.

Il est clair que compte-tenu de la configuration d'écoulements d'ORACLES, ce choix est tout à fait pertinent en ce qui concerne δ_{amont}, en revanche, en ce qui concerne δ_{aval}, nous sommes bien conscients du fait que l'écoulement juste en aval de l'élargissement ne possède évidemment pas les propriétés d'un écoulement de canal turbulent pleinement développé et que la valeur obtenue en faisant cette hypothèse n'est pas forcément adaptée localement. Néanmoins et compte-tenu de la difficulté qu'il y aurait à moduler la valeur de δ_{aval} en fonction de la position par rapport à l'élargissement, nous avons retenu la présente approche comme représentant un compromis acceptable. Ainsi, pour déterminer δ_{amont}, nous calculons l'écoulement turbulent au sein d'un canal dont la hauteur sera égale à celle d'un canal d'alimentation d'ORACLES soit $0,0304\ m$ alors que pour déterminer δ_{aval}, cette hauteur sera choisie égale à $0,1503\ m$. Le critère retenu pour déterminer δ_{amont} et δ_{aval} consiste à repérer sur un profil d'évolution normale à la paroi de k, le point F où la loi de paroi retenue dans N3SNatur se trouve être "réalisée", c'est à dire celui où l'on obtient $k_F = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}$ avec la vitesse de frottement calculée à partir de la dérivée normale à la paroi du profil de la composante longitudinale moyenne de la vitesse. Pour pouvoir appliquer

cette technique, il faut bien sûr pouvoir réaliser les calculs jusqu'au niveau des parois solides ce qui nous a conduits à réaliser ceux-ci avec Jason2D qui est équipé d'un modèle de turbulence à bas nombre de Reynolds. Compte-tenu de la morphologie du profil de k en proche paroi, il existe deux points, de part et d'autre de la valeur maximale $k_{\max}$ atteinte, qui sont tels que $k_F = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}$. Nous choisissons comme point F, celui qui se situe au sein de la zone logarithmique d'évolution

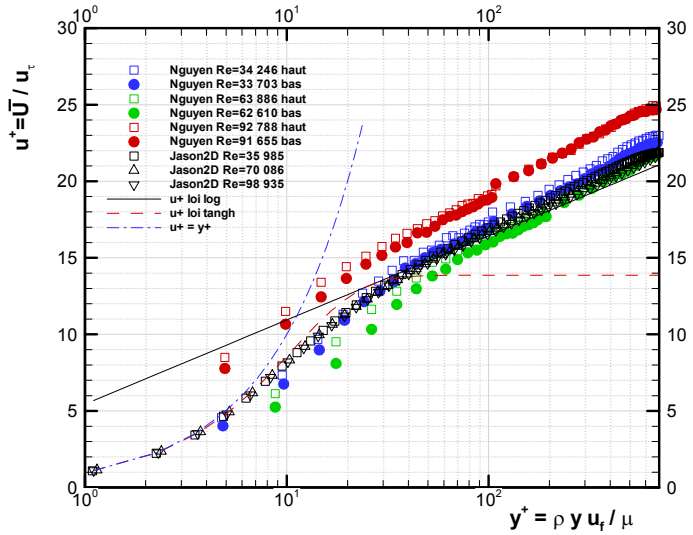

FIG. 5.3 – Écoulements de canal turbulents, profils de la composante moyenne longitudinale de la vitesse réduite par la vitesse de frottement : comparaison entre les resultats numériques obtenus avec Jason2D et les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ (la valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

de la vitesse, c'est à dire celui des deux points qui est le plus éloigné de la paroi solide. La distance entre le point F retenu et la paroi solide fournit alors la valeur de δ recherchée. La géométrie du domaine rectangulaire de calcul est précisée sur la figure 5.2. La longueur $L_{AD} = L_{BC}$ est choisie égale à $40H_{AB} = 0,608m$ (cas du canal d'alimentation) ou $23H_{AB} = 1,5m$ (cas de la veine d'essai). Les calculs sont réalisés sur un demi-canal en utilisant une condition de symétrie sur l'axe central BC. La valeur de la demi-hauteur de canal H_{AB} est égale $0,01502m$ (cas du canal d'alimentation) ou $0,06530m$ (cas de la veine d'essai). Les autres conditions aux limites sont i) de type Dirichlet sur le segment d'entrée AB pour toutes les variables sauf la pression statique qui est extrapolée à partir des valeurs à l'intérieur du domaine de calcul, ii) de type paroi adhérente sur le segment AD, soit une mise à zéro de toutes les variables sauf la pression pariétale qui est calculée en supposant que sa dérivée normale à la paroi est nulle et iii) de type Neumann sur le segment de sortie CD, sauf pour la pression statique, dont le niveau

en paroi est imposé comme niveau de référence et sert ensuite à calculer le profil de pression en sortie en supposant l'écoulement turbulent comme étant pleinement développé et donc qu'à ce niveau, on peut supposer que la grandeur $\bar{p} + \frac{2}{3}\bar{\rho}k$ est constante sur le segment de sortie CD. Les maillages structurés non uniformes utilisés comportent tous 41 noeuds dans la direction de l'écoulement et 91 noeuds dans la direction normale à la paroi. Ils diffèrent en revanche par le reserrement des noeuds près de la paroi AD qui est modulé en fonction du nombre de Reynolds de l'écoulement de manière à avoir typiquement aux alentours de cinq noeuds de calcul dans la zone comprise dans l'intervalle $[0, y^+ = 10]$. Par exemple, pour les calculs sur la géométrie du canal d'alimentation, le premier noeud de calcul se trouve à $2,16\ 10^{-5}m$ de la paroi pour le débit d'alimentation le plus faible correspondant aux écoulements nc_1, c_1, c_2, et c_3. Cette distance est

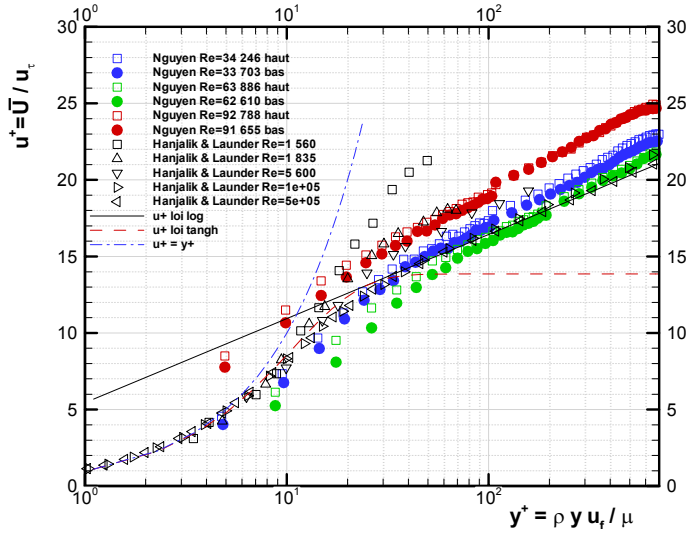

FIG. 5.4 – Écoulements de canal turbulents, profils de la composante moyenne longitudinale de la vitesse réduite par la vitesse de frottement : comparaison entre les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ et par Hanjalik et Launder [37] (La valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

réduite à $8,71\ 10^{-6}m$ pour le débit d'alimentation le plus élevé correspondant aux écoulements nm_1 et m_1. Précisons également que lorsque nous calculons un écoulement de canal turbulent sur la géométrie de la veine d'essai, le débit considéré est bien sûr pris égal à la somme des débits des deux canaux d'alimentation. Étant donné que les écoulements que nous simulerons sur ORACLES correspondent à trois débits d'alimentation différents, nous avons donc réalisé six calculs d'écoulement de canal différents pour déterminer chaque valeur du couple $(\delta_{amont}, \delta_{aval})$ à utiliser pour chacun des trois débits. Le tableau 5.1 indique les valeurs qui ont été obtenues, et qui se caractérisent par une dimunition logique de δ lorsque le débit augmente.

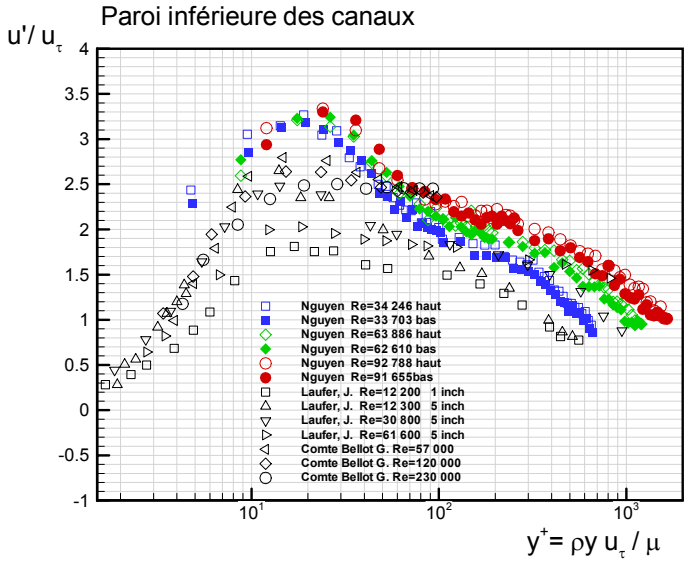

FIG. 5.5 – Écoulements de canal turbulents, profils de la composante moyenne longitudinale des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse réduite par la vitesse de frottement : comparaison entre les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ et par Laufer [47] et Comte-Bellot [20] (La valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

Écoulements concernés	δ_{amont} (mm)	δ_{aval} (mm)
nc_1, c_1, c_2, c_3	$1,95$	$5,47$
nh_1, h_1	$1,35$	$3,66$
nm_1, m_1	$1,10$	$2,83$

TAB. 5.1 – Valeurs des distances à la paroi obtenues à partir des calculs avec Jason2D et compatibles avec l'utilisation d'une loi de paroi pour les différents écoulements qui seront simulés sur ORACLES avec N3SNatur.

Des exemples de profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne obtenus, dans le cas de la recherche de δ_{amont}, donc sur la géométrie des canaux d'alimentation, sont présentés sur la figure 5.3 et peuvent être comparés avec ceux obtenus expérimentalement par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$. Il est à noter que, sur la légende de cette figure, la valeur du nombre

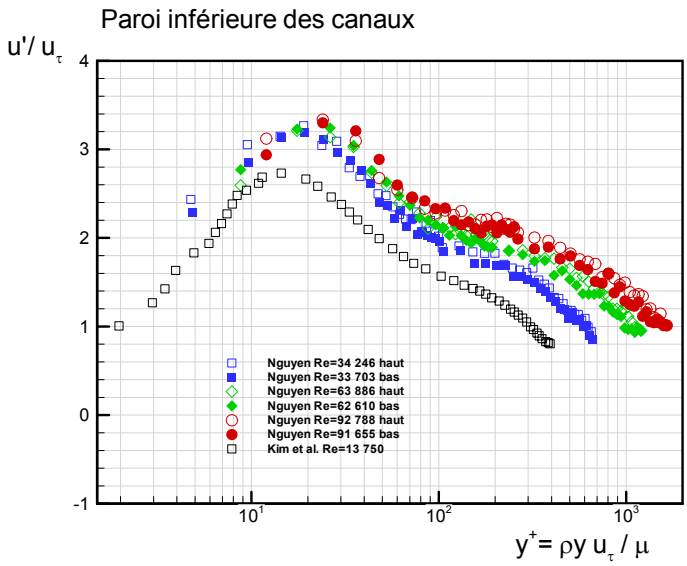

FIG. 5.6 – Écoulements de canal turbulents, profils des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse réduite par la vitesse de frottement : comparaison entre les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ et les résultats de simulation numérique directe de Kim [44] (La valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

de Reynolds indiquée correspond à la valeur $\mathrm{Re}_{\max}$, du nombre de Reynolds calculée en prenant comme vitesse de référence la vitesse maximale sur l'axe et non la vitesse débitante. La raison de ce choix tient au fait que nous présenterons un peu plus loin d'autres profils issus de la littérature et que les conditions expérimentales pour ces derniers, en particulier le nombre de Reynolds est défini à partir de la vitesse maximale. Les profils calculés de la vitesse réduite $u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} = f(y^+)$

se regroupent bien sur les courbes théoriques associées respectivement à la sous-couche visqueuse et à la zone logarithmique. On remarque que l'accord calcul-expérience est excellent en ce qui concerne le débit d'alimentation correspondant aux écoulements nc_1, c_1, c_2, et c_3, en revanche, pour les deux autres débits considérés, on observe que les points expérimentaux se situent au-dessus des points numériques pour le débit le plus élevé correspondant aux écoulements nm_1 et m_1 (symboles en rouge sur la figure) et en-dessous pour le débit intermédiaire correspondant aux écoulements nh_1 et h_1 (symboles en vert sur la figure). Intrigués par ce comportement, nous

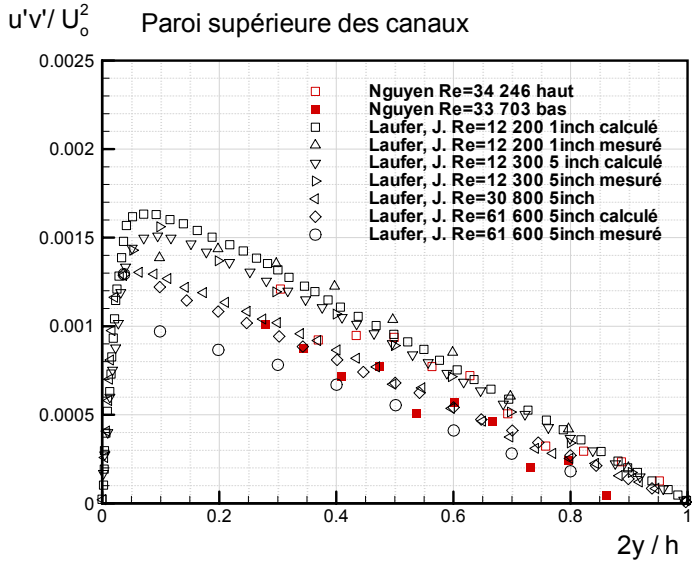

FIG. 5.7 – Écoulements de canal turbulents, profils du cisaillement moyen réduit par la vitesse maximale sur l'axe du canal : comparaison entre les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ et les résultats de Laufer (La valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

avons alors confronté les données expérimentales de Nguyen [54] à d'autres données disponibles dans la littérature, que ce soit pour la composante longitudinale de la vitesse moyenne avec les données de Hanjalik et Launder [37] ou les fluctuations rms de cette même composante de vitesse avec les données issues des simulations numériques directes de Kim et al. [44] et des études expérimentales de Comte-Bellot [20] ou de Laufer [47]. En ce qui concerne les profils de vitesse moyenne représentés sur la figure 5.4, on observe que plus le nombre de Reynolds augmente et plus les profils obtenus par Hanjalik et Launder [37] se regroupent parfaitement sur les courbes d'évolution théoriques attendues. Le décalage le plus important dans les données de Nguyen [54] est observé pour l'écoulement le plus rapide m_1. On observe bien une large zone d'évolution logarithmique mais l'amorce de la sous-couche visqueuse tarde à apparaître lorsque y^+ diminue. L'analyse des fluctuations de vitesse associées dont les profils sont présentés sur les figures 5.5

et 5.6 ne révèlent pas de différence de comportement particulière entre les données obtenues sur ORACLES et celles de la littérature. On peut néanmoins souligner l'excellent accord, en terme de morphologie, entre les profils calculés par Kim [44] et ceux obtenus expérimentalement par Nguyen [54]. En ce qui concerne la contrainte moyenne de cisaillement, les résultats obtenus sur ORACLES sont tout à fait semblables à ceux obtenus par Laufer [47]. Ce bref survol nous indique que, dans l'ensemble, les données expérimentales obtenues par Nguyen [54] sont suffisamment proches de celles d'un écoulement de canal turbulent pleinement développé pour que nous puissions supposer que, dans les canaux d'alimentation d'ORACLES, les profils d'entrée à utiliser comme conditions aux limites en $x = -5h$ pourront être générés en effectuant un calcul annexe de canal turbulent avec N3SNatur et en choisissant la distance de la paroi de la première facette d'élément égale à celle déterminée par l'application de la méthodologie précédemment exposée.

5.2 Générations de profils d'entrée pour les calculs sur ORACLES avec N3SNatur

Les distances δ_{amont} et δ_{aval} ayant été déterminées précédemment, nous pouvons maintenant vérifier si, en calculant avec N3SNatur les mêmes écoulements de canal turbulents calculés précédemment avec Jason2D, nous obtenons des profils identiques qui se superposent sur la plage de variation commune de y ou de y^+. Si tel est le cas, alors cela signifiera que les valeurs de δ_{amont} et δ_{aval} sont bien adaptées au calcul N3SNatur avec loi de paroi, ce qui nous permettra d'utiliser ces résultats pour nous en servir comme conditions aux limites d'entrée sur les calculs ORACLES à venir.

Écoulement d'alimentation ORACLES simulé	Dimensions du domaine de calcul $H = 0,0304\ m$		δ_{paroi} (mm)	Propriétés du maillage	
	Hauteur	Longueur		*Nombre d'éléments*	*Nombre de noeuds*
Re = **25000**	$0,5H$	$33H$	$1,95$	80710	41835
Re = **50000**	$0,5H$	$33H$	$1,35$	70940	36772
Re = **75000**	$0,5H$	$33H$	$1,10$	61240	36922

TAB. 5.2 – Calcul d'écoulements turbulents de canal : paramètres de base des maillages utilisés avec N3SNatur.

Écoulement d'alimentation ORACLES simulé	Vitesse de frottement (m/s)	
	N3SNatur	Jason2D
Re = **25000**	$0,7277$	$0,7142$
Re = **50000**	$1,3114$	$1,3114$
Re = **75000**	$1,7914$	$1,7970$

TAB. 5.3 – Calcul d'écoulements turbulents de canal : valeurs de la vitesse de frottement obtenues avec N3SNatur et Jason2D.

Les paramètres principaux des maillages utilisés pour ces calculs d'écoulements de canal avec N3SNatur sont précisés sur le tableau 5.2 et le détail de la morphologie d'un maillage à l'entrée du domaine de calcul est présenté sur la figure 5.8.

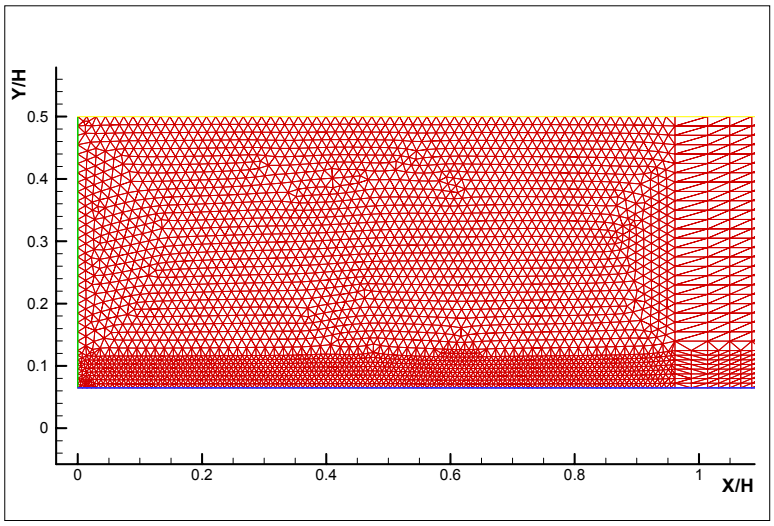

FIG. 5.8 – Simulation d'écoulements de canal turbulents avec N3SNatur : zoom sur le maillage utilisé à l'entrée du canal pour le cas $Re = 25000$.

Le tableau 5.3 permet de comparer les valeurs de la vitesse de frottement obtenues avec N3SNatur (loi de paroi) d'une part et avec Jason2D (modèle de turbulence à bas nombre de Reynolds) d'autre part. On observe que l'accord entre les résultats fournis par les deux programmes de calcul est excellent. Ceci indique également que le maillage retenu pour N3SNatur est bien adapté en particulier en ce qui concerne le choix de la valeur de la distance à la paroi δ.

Cet excellent accord se retrouve également sur les profils typiques obtenus pour toutes le variables calculées comme le montre la figure 5.9 pour les trois écoulements considérés. Si l'on compare maintenant les résultats obtenus avec N3SNatur avec les données expérimentales de Nguyen [54], on retrouve le même type de positionnement qu'obtenu avec Jason2D comme

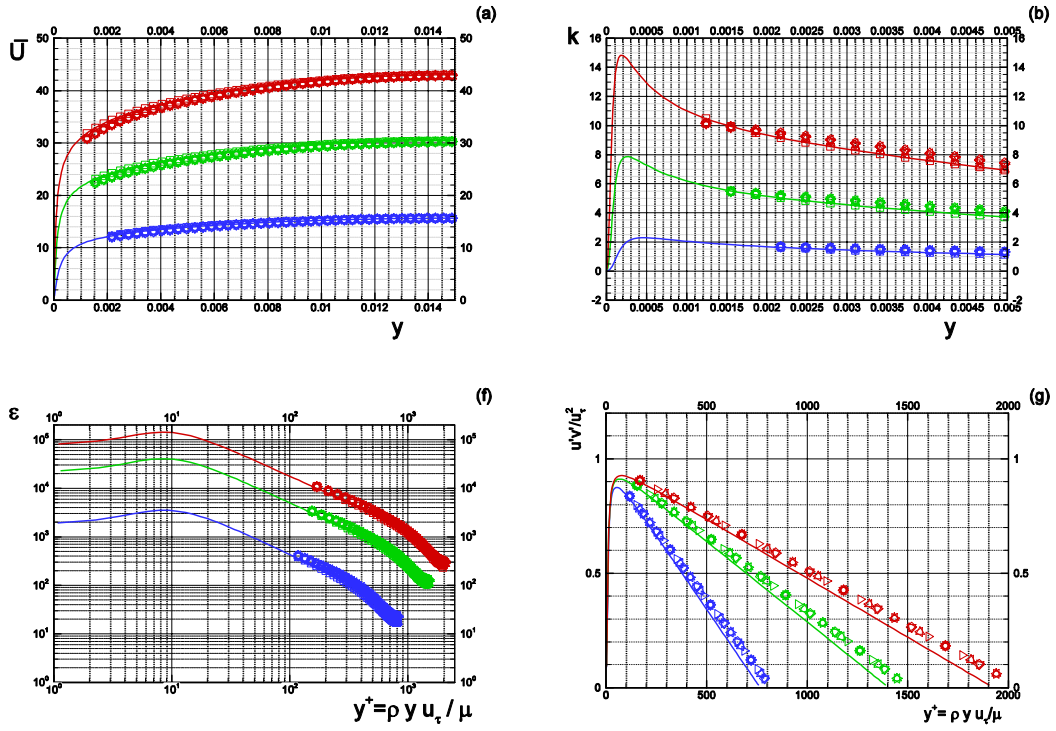

FIG. 5.9 – Écoulements de canal turbulents : comparaison entre les résultats obtenus avec N3SNatur (symbôles) et Jason2D (ligne continues) pour les trois différents débits d'alimentation d'ORACLES (En bleu Re = **25000**, en vert Re = **50000** et en rouge Re = **75000**).

l'illustrent les résultats de la figure 5.10 qui présente les profils de fluctuations moyennes de la composante longitudinale de la vitesse.

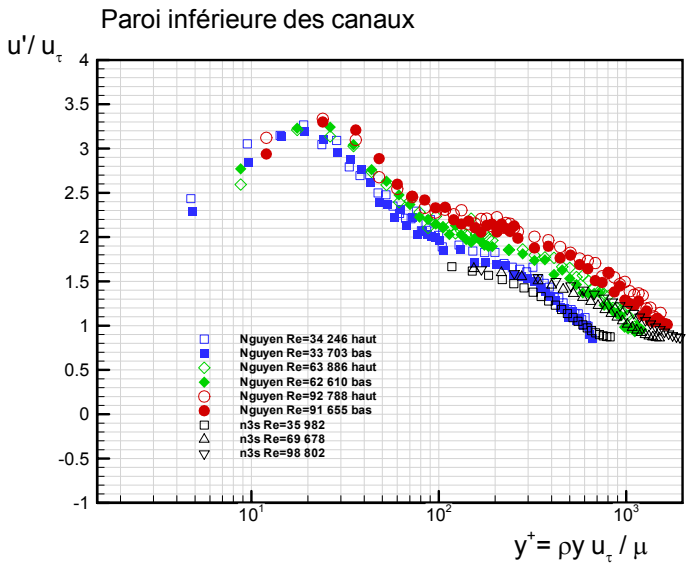

FIG. 5.10 – Écoulements de canal turbulents, profils des fluctuations de la composante moyenne longitudinale de la vitesse réduite par la vitesse de frottement : comparaison entre les resultats numériques obtenus avec N3SNatur et les résultats expérimentaux obtenus par Nguyen [54] sur ORACLES en $x = -5h$ (la valeur du nombre de Reynolds est calculée en utilisant la vitesse maximale sur l'axe de symétrie du canal).

Ainsi, les résultats que nous avons obtenus avec N3SNatur pour la simulation des écoulements d'alimentation d'ORACLES vont donc nous permettre de prescrire de manière précise les conditions aux limites au niveau des deux canaux d'alimentation d'ORACLES en $x = -5h$. Notons que ces profils seront utilisés aussi bien pour la simulation des écoulements inertes que pour celle des écoulements réactifs.

5.3 Estimateur d'écart simulation vs expérience

Avant de passer à la présentation des résultats obtenus sur ORACLES, il nous semble important d'introduire un estimateur qui nous permette de quantifier l'écart entre les résultats numériques obtenus et les résultats expérimentaux de Nguyen [54]. Ainsi, il sera possible d'afficher le niveau de qualité de prévision associée à l'utilisation des modèles physiques retenus dans ce travail et de permettre, à l'avenir, d'estimer précisément le gain en qualité de prévision associé à l'utilisation de modèles physiques réputés, *a priori*, plus performants et ce, en évitant toute "subjectivité" liée en particulier à des effets "déformants" associés par exemple aux échelles

retenues lors de la présentation des résultats. La structure de la base de données ORACLES que nous avons décrite dans la première partie de ce mémoire étant articulée autour de la donnée des profils des grandeurs mesurées à différentes abscisses $x = nh$, nous avons choisi de retenir un estimateur par profil de mesure pour chaque variable concernée. Ainsi, pour la variable Ψ, nous introduisons l'estimation d'écart simulation-expérience $\mathbf{E}_{nh}^{\Psi}$ qui sera défini par une expression de type norme L_1, soit :

$$\mathbf{E}_{nh}^{\Psi} = \frac{1}{N_{nh}} \left(\frac{\sum_{i=1}^{N_{nh}} \sqrt{\|\Psi_{num} - \Psi_{exp}\|^2}}{\Psi_{réf}} \right) \tag{5.1}$$

où N_{nh} représente le cardinal de l'ensemble des points expérimentaux disponibles pour le profil considéré et où $\Psi_{réf}$ est une grandeur de référence, soit U_b pour $\Psi \equiv \bar{U}, \bar{V}, u', v'$ et ${U_b}^2$ pour $\Psi = u'v'$. Pour chaque abscisse donnée, les points de comparaison seront donc pris aux ordonnées pour lesquelles il existe une mesure, ce qui nous conduira, si nécessaire, à interpoler linéairement les profils numériques pour disposer des valeurs numériques à ces mêmes ordonnées.

Chapitre 6

Écoulements inertes

6.1 Procédures d'initialisation et paramètres de calcul

L'ensemble des résultats que nous présentons dans ce chapitre ont été obtenus en utilisant le modèle $k-\varepsilon$ standard, une intégration implicite des équations, le préconditionnement bas Mach de Roe-Turkel où β est la valeur du préconditionnement qui s'identifie au nombre de Mach de l'écoulement. Tous les calculs ont été réalisés en utilisant une intégration du premier ordre en temps et du deuxième ordre en espace, sans limiteur de pente. Les principales caractéristiques des maillages retenus, après divers essais, sont données sur le tableau 6.1. Ces maillages ont été construits avec le mailleur ICEMCFD. Etant donné que les champs obtenus de vitesse et de turbulence sont destinés à être utilisés afin d'initialiser ces mêmes grandeurs pour les calculs des écoulements réactifs, nous avons choisi ces maillages après un certain nombre de simulations initiales d'écoulements réactifs de manière à pouvoir utiliser les mêmes maillages, que les écoulements soient inertes ou réactifs. Un exemple typique de la morphologie des maillages finalement retenus à l'issue de cette phase préparatoire, au niveau de l'élargissement brusque, est donné sur la figure 6.1 qui correspond au maillage utilisé pour la simulation de l'écoulement inerte nc_1 mais également pour celle des écoulements réactifs c_1, c_2 et c_3.

Écoulement ORACLES simulé	Propriétés du maillage ($h = 0,0299\ m$)				
	Extension longitudinale	δ_{amont} (mm)	δ_{aval} (mm)	*Nombre d'éléments*	*Nombre de noeuds*
nc_1, Re = **25000**	$-5h$ à $15h$	$1,95$	$5,47$	15720	8074
nh_1, Re = **50000**	$-5h$ à $15h$	$1,35$	$3,66$	18984	9725
nm_1, Re = **75000**	$-5h$ à $15h$	$1,10$	$2,83$	19836	10159

TAB. 6.1 – Calcul des écoulements turbulents inertes sur ORACLES : paramètres de base des maillages utilisés avec N3SNatur.

Les valeurs des paramètres principaux relatifs aux calculs sont données sur le tableau 6.2.

Paramètres de calcul					
Cas	β	CFL	Pas de temps (s)	Valeur minimale atteignable du résidu de vitesse	Nombre d'iterations correspondant
nc1	0,033	5000	5,02E-03	5,58E-12	1,00E+04
nh1	0.067	5000	6,04E-03	9,85E-13	5,00E+03
nm1	0,1	5000	4,33E-03	9,51E-14	1,00E+04

TAB. 6.2 – Paramètres de calcul utilisés pour la simulation des écoulements inertes.

Pour initialiser les variables dans tout le domaine de calcul, nous avons procédé de la manière suivante : la composante longitudinale de la vitesse moyenne est prise égale à la vitesse débitante U_b alors que la composante normale est prise égale à zéro. Les valeurs de k et de ϵ sont prises égales aux valeurs "injectées" sur l'axe des canaux d'alimentation.

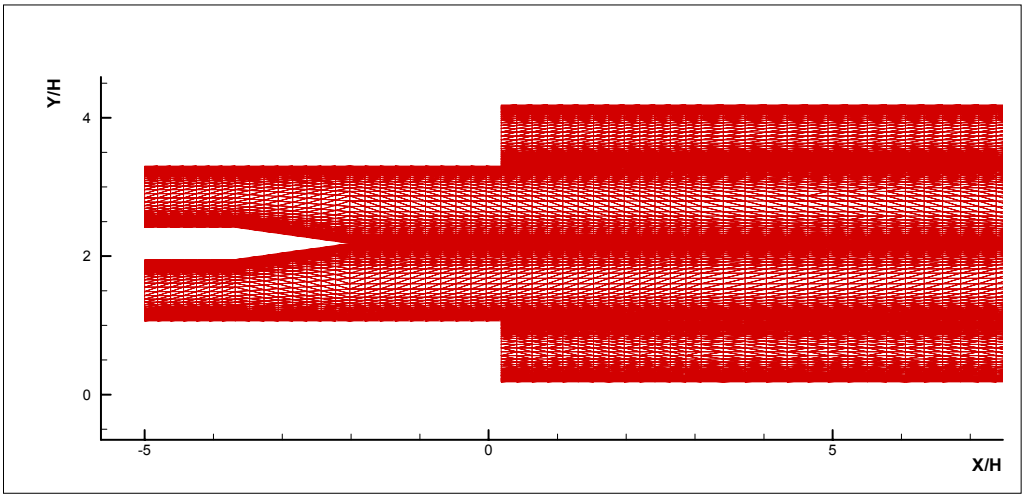

FIG. 6.1 – Détail, au niveau de l'élargissement brusque du maillage utilisé pour la simulation de l'écoulement nc_1 (et également les écoulements réactifs c_1, c_2 et c_3).

6.2 Propriétés des champs moyens - confrontation qualitative simulations-expérimentation

Compte-tenu de la masse importante de résultats dont nous disposons, nous avons choisi de présenter ceux-ci en associant à chaque fois les trois écoulements étudiés, ce qui permet de visualiser au premier coup d'oeil les ressemblances ou les différences qui les caractérisent.

6.2.1 Caractéristiques d'ensemble

La figure 6.2 permet de saisir immédiatement la structure moyenne des écoulements simulés. En effet, ces champs de la composante longitudinale de la vitesse moyenne, réduite par la vitesse débitante, permettent d'observer clairement la présence (attendue) des deux zones de recirculation moyenne. Pour les trois écoulements considérés, ces deux zones ne présentent pas la même extension longitudinale, l'écoulement moyen en aval de l'élargissement brusque n'est donc pas symétrique, ce qui est l'une des propriétés fondamentales de ces écoulements telles que l'étude expérimentale l'a montré. De plus, cette dissymétrie est "orientée" dans le même sens que celui observé expérimentalement, c'est à dire que c'est la zone de recirculation supérieure qui possède l'extension longitudinale la plus importante. La comparaison entre les longueurs obtenues numériquement et expérimentalement est possible à partir des valeurs indiquées par le tableau 6.3. En ce qui concerne la zone de recirculation inférieure, on observe ainsi un écart relatif maximum de moins de 10 % sur sa longueur.

	Longueur des zones de recirculation			
	Inférieure		**S**upérieure	
Cas	expérimental	numérique	expérimental	numérique
nc_1	$5,5h$	$5h$	$8,0h$	$9,8h$
nh_1	$5,5h$	$5,3h$	$10,0h$	$8,8h$
nm_1	$5,5h$	$5,5h$	$9,5h$	$8,5h$

TAB. 6.3 – Longueur des zones de recirculation des écoulements inertes simulés.

Pour la zone supérieure, la situation est plus contrastée. En effet, pour l'écoulement le plus lent nc_1, la simulation numérique surestime la longueur de cette zone d'environ 22 % alors que pour l'écoulement le plus rapide nm_1, on observe au contraire une sous-estimation de cette longueur de l'ordre de 11 %. Cette dissymétrie de l'écoulement est également bien visible sur la figure 6.3 qui présente le champ de la composante normale de la vitesse moyenne. On observe en effet que la déflexion vers le bas du sillage central de l'écoulement, caractérisée par la présence de valeurs négatives de la composante normale de la vitesse moyenne, est présente pour des valeurs de y supérieures à celle correspondant au plan de symétrie de la géométrie du banc, soit $y = 2,18h$. Le champ de l'énergie cinétique k de la turbulence est présenté quant à lui sur la figure 6.4. On y observe bien que les zones où k atteint ses valeurs maximales se situent au niveau de la périphérie des couches de cisaillement libres, un peu en amont et au-dessus de la position du point moyen de recollement pariétal. On note également la très forte augmentation du niveau de k dans ces zones entre l'écoulement le plus lent nc_1 et le plus rapide nm_1. En bref, on peut dire que qualitativement, les simulations permettent de restituer assez correctement la structure d'ensemble moyenne de l'écoulement. Passons maintenant à des comparaisons

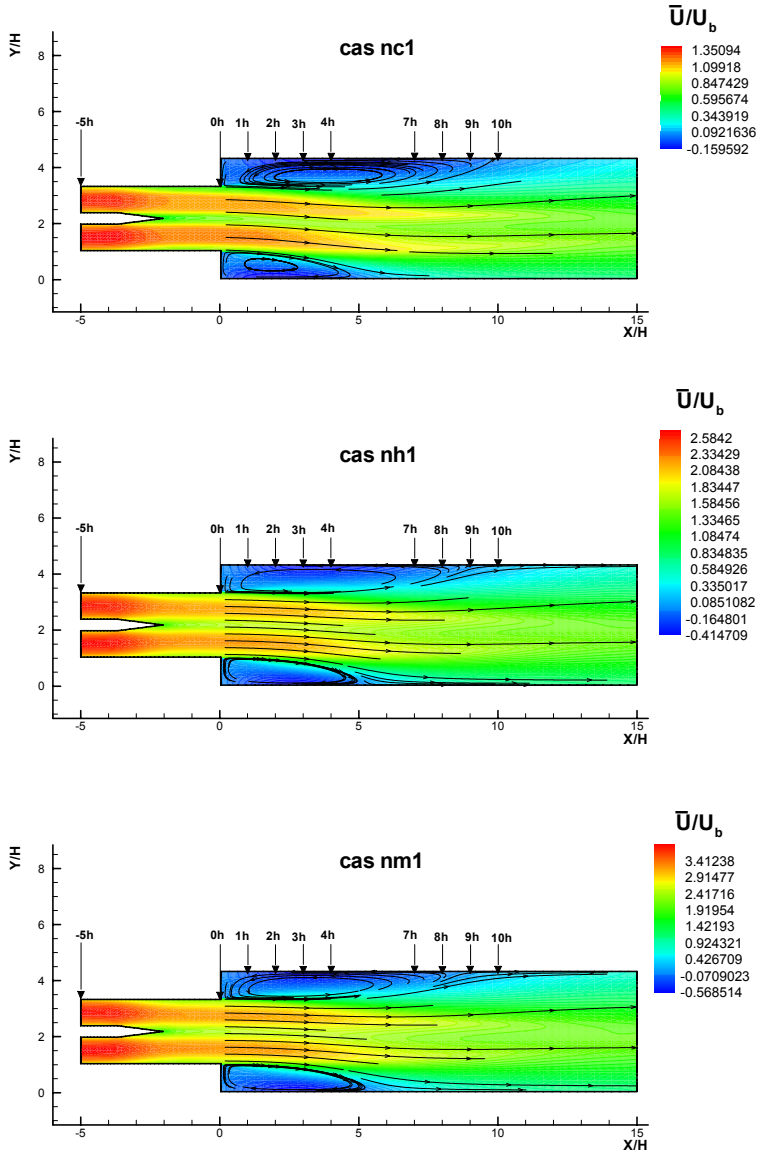

FIG. 6.2 – Simulation des écoulements inertes nc_1, nh_1 et nm_1 : champ de la composante longitidinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas nc_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas nh_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas nm_1, $U_b = 33\ m/s$).

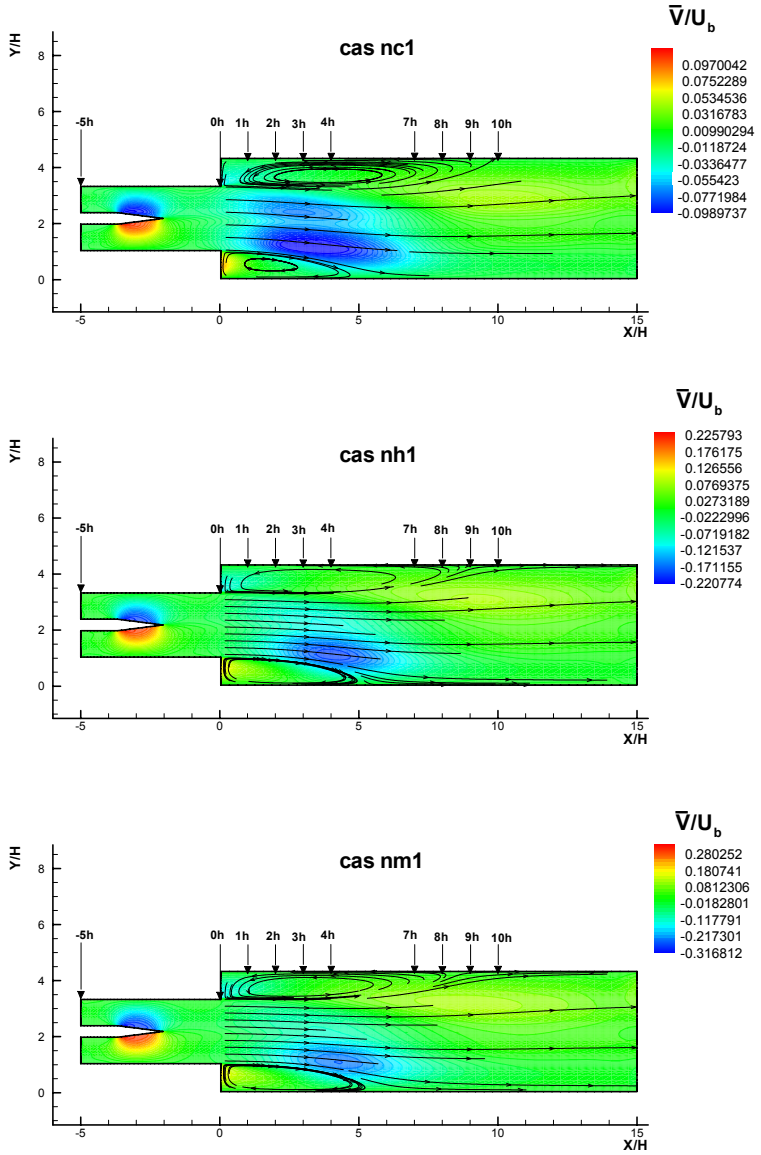

FIG. 6.3 – Simulation des écoulements inertes nc_1, nh_1 et nm_1 : champ de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas nc_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas nh_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas nm_1, $U_b = 33\ m/s$).

simulations-expériences un peu plus "précises". Les profils issus de nos simulations numériques sont donc maintenant systématiquement confrontés à leurs homologues issus de l'expérimentation lorsque ceux-ci étaient disponibles.

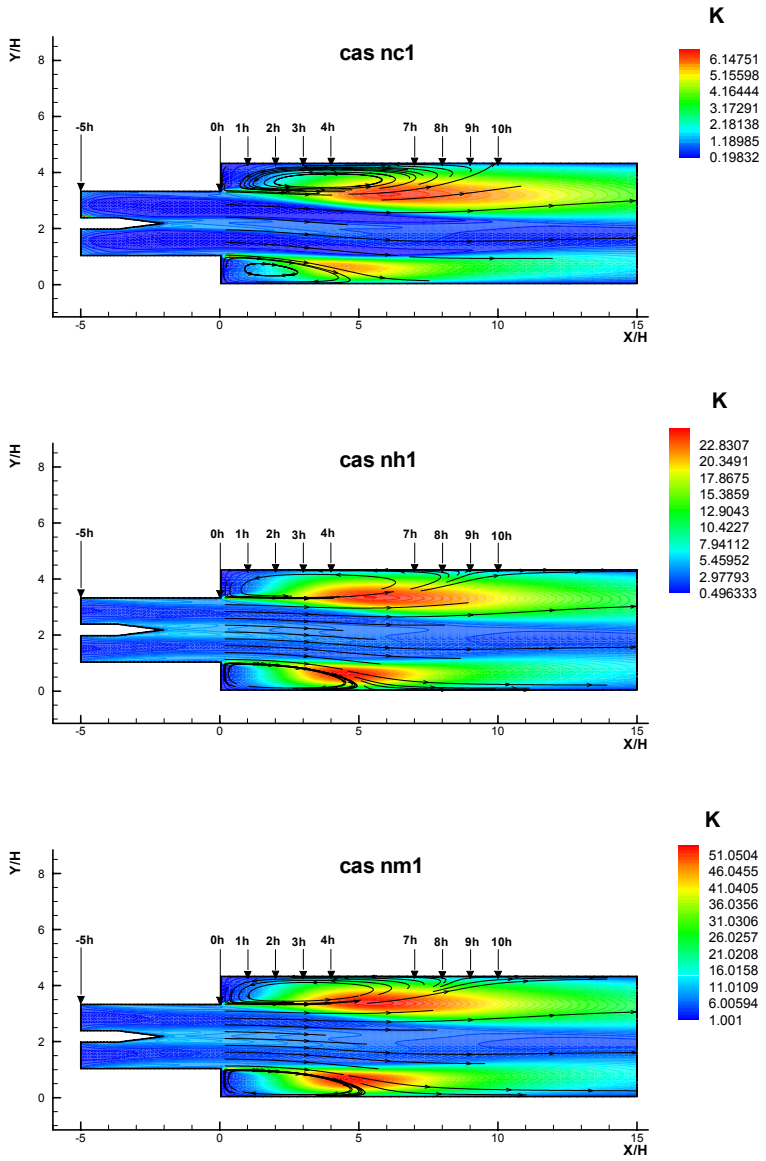

FIG. 6.4 – Simulation des écoulements inertes nc_1, nh_1 et nm_1 : champ de l'énergie cinétique de la turbulence (en m^2/s^2).

L'évolution pour les trois écoulements des profils de la composante longitudinale $\bar{U}$ dans le champ proche entre $x = -5h$ et $x = 3h$ est présentée sur la figure 6.5 alors que l'évolution dans le champ plus lointain de l'écoulement, soit de $x = 4h$ à $x = 10h$, est donnée sur la figure 6.6.. En ce qui concerne le champ proche, les profils de $\bar{U}$ sont en excellent accord avec leurs homologues

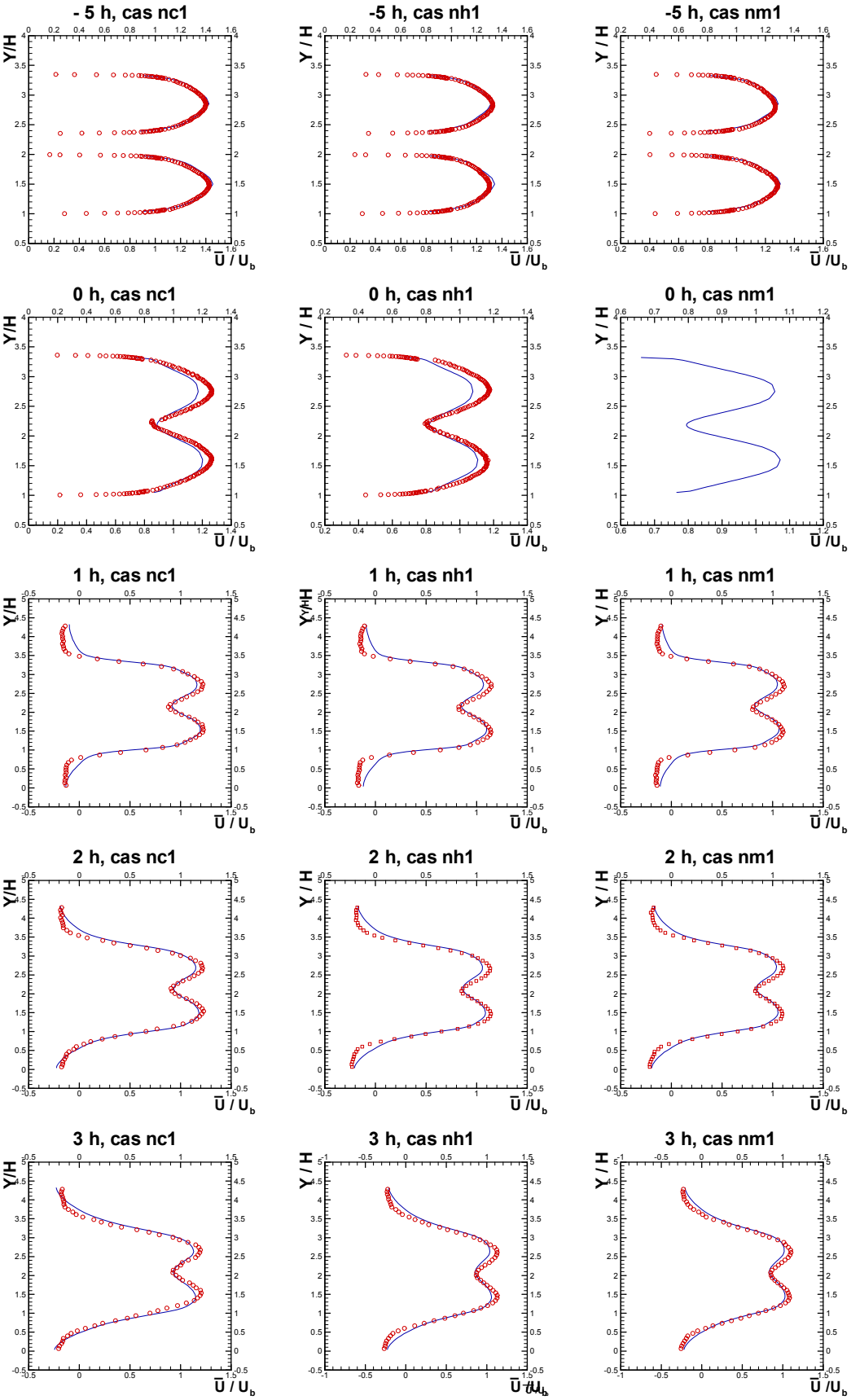

FIG. 6.5 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante longitudinale $\bar{U}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

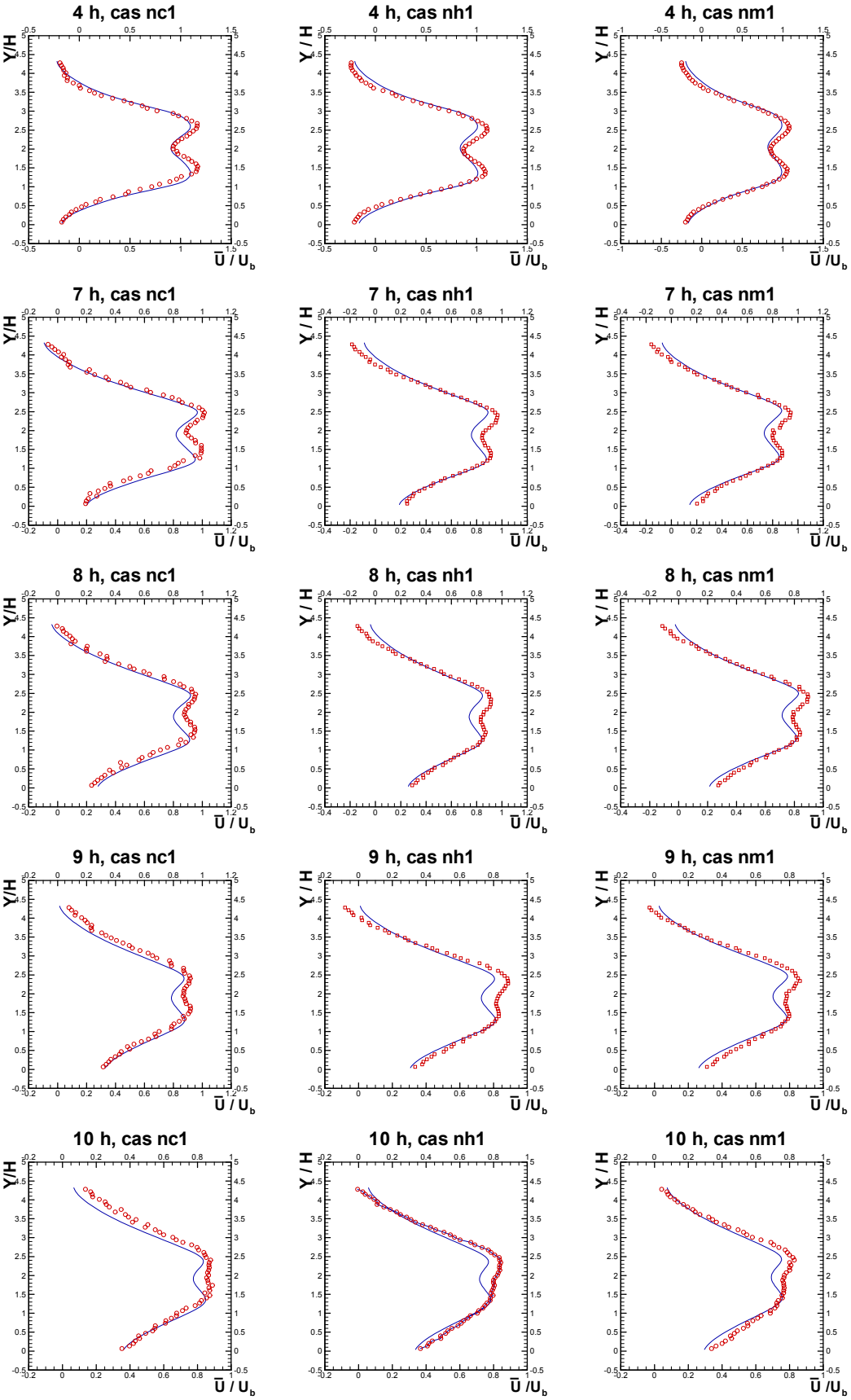

FIG. 6.6 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante longitudinale $\bar{U}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

expérimentaux. Bien sûr, les différences précédemment relevées en ce qui concerne la longueur de la zone de recirculation moyenne supérieure conduisent à la présence de certains écarts locaux, mais on observe néanmoins une excellente superposition en ce qui concerne la position des deux couches de cisaillement et de la zone de sillage. En ce qui concerne le champ lointain, on retrouve également un accord très satisfaisant. On observe toutefois un petit décalage qui apparaît au niveau de la zone centrale de l'écoulement au sein de laquelle l'évolution du profil de vitesse associée à la résorption progressive du défaut de vitesse lié au sillage de la plaque séparatrice initiale apparaît plus rapide au niveau expérimental que dans les simulations. En ce qui concerne la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne, nous ne disposons des données expérimentales que pour le cas nc_1. Dans la zone de champ proche, les faibles valeurs de cette composante de la vitesse apparaissent assez fortement dispersées sur l'échantillon expérimental, comme le montre la figure 6.7 et l'on ne peut pas véritablement conclure en terme de qualité de prévision des simulations. En revanche, dès lors que la zone de sillage centrale va être suffisamment défléchie vers le bas, conduisant par là-même à l'obtention d'une tendance d'évolution longitudinale des profils de cette composante plus affirmée dans la zone plus en aval de l'élargissement, on retrouve au niveau de nos résultats numériques une tendance d'évolution et une morphologie des profils assez similaire à celle qui est observée expérimentalement, comme le montrent les résultats présentés sur la figure 6.8. Ainsi, l'analyse de l'évolution des profils des composantes de la vitesse moyenne confirme t'elle ce que nous avions observé à partir du tracé des seuls champs issus des simulations numériques, à savoir que, qualitativement, la structure du champ de vitesse moyenne est bien reproduite par nos simulations et ce pour les trois écoulements considérés.

Nous avons également représenté sur les figures 6.9 et 6.10 l'évolution des profils de k, bien que nous ne disposions pas de données expérimentales directes en ce qui concerne cette grandeur. On distingue clairement les deux pics d'énergie cinétique de la turbulence qui apparaissent en $x = 0h$ au niveau de la naissance des deux couches de cisaillement libres et qui sont particulièrement bien marqués en $x = 1h$. On observe également les deux légères "bosses" au niveau de la zone de développement central du sillage. Ces deux bosses se résorbent assez rapidement et ont quasiment disparu dès $x = 4h$. Dans le même temps, les deux pics associés au cisaillement intense en périphérie des zones de recirculation s'élargissent considérablement tout en voyant leur valeur maximale augmenter de manière importante.

A partir des profils calculés de vitesse moyenne, de k et de ε, il nous est possible de calculer les fluctuations moyennes de vitesse associées aux deux composantes de la vitesse considérées à partir de la formulation de Boussinesq retenue et de les comparer aux mesures effectuées par Nguyen [54]. Pour les trois écoulements considérés, la cohérence, en terme de morphologie et d'évolution spatiale de cette dernière, des profils de la fluctuation moyenne de la composante longitudinale de la vitesse obtenus à partir de nos simulations numériques avec les tendances observées expérimentalement est satisfaisante. Comme l'indiquent les résultats présentés sur les

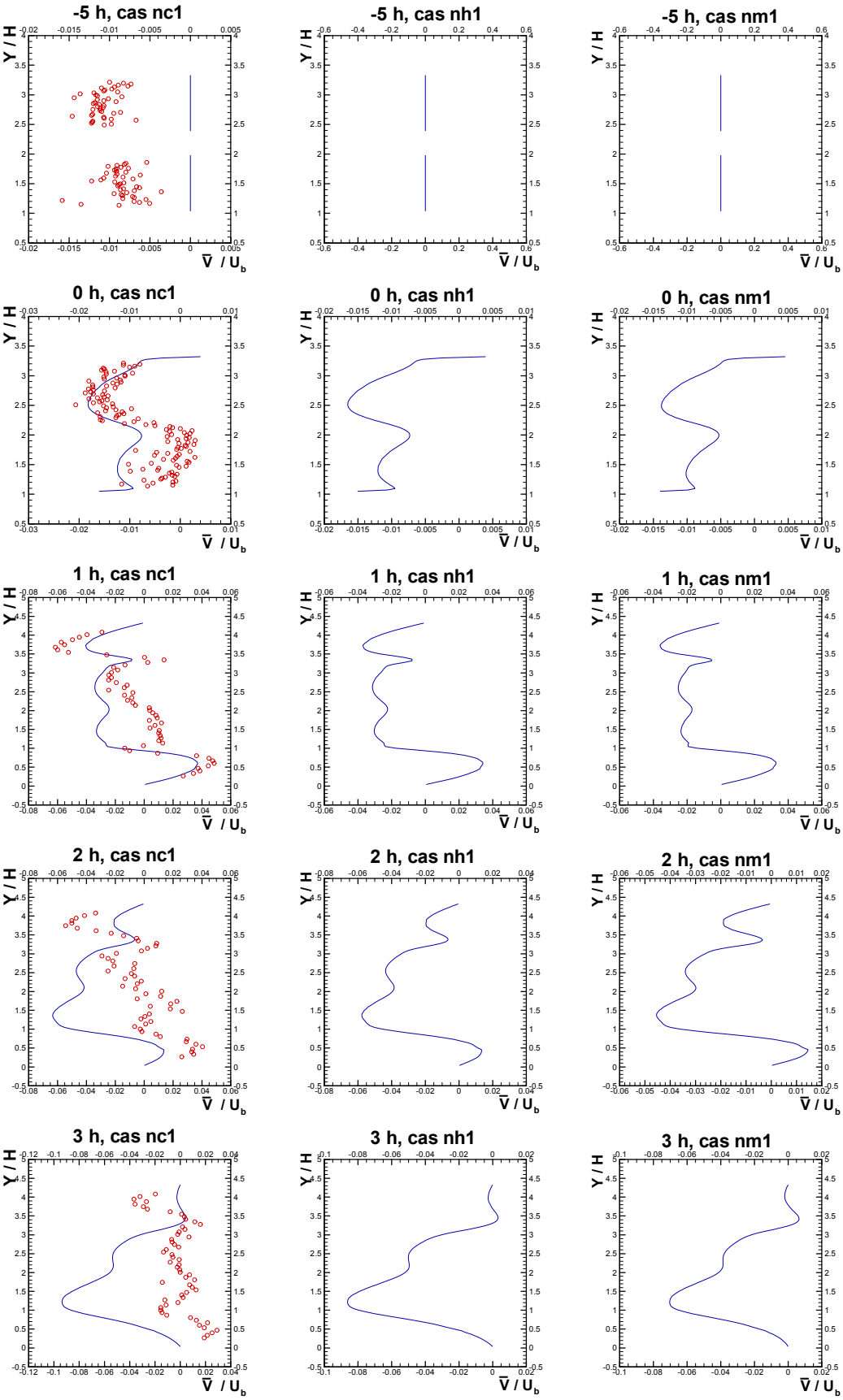

FIG. 6.7 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

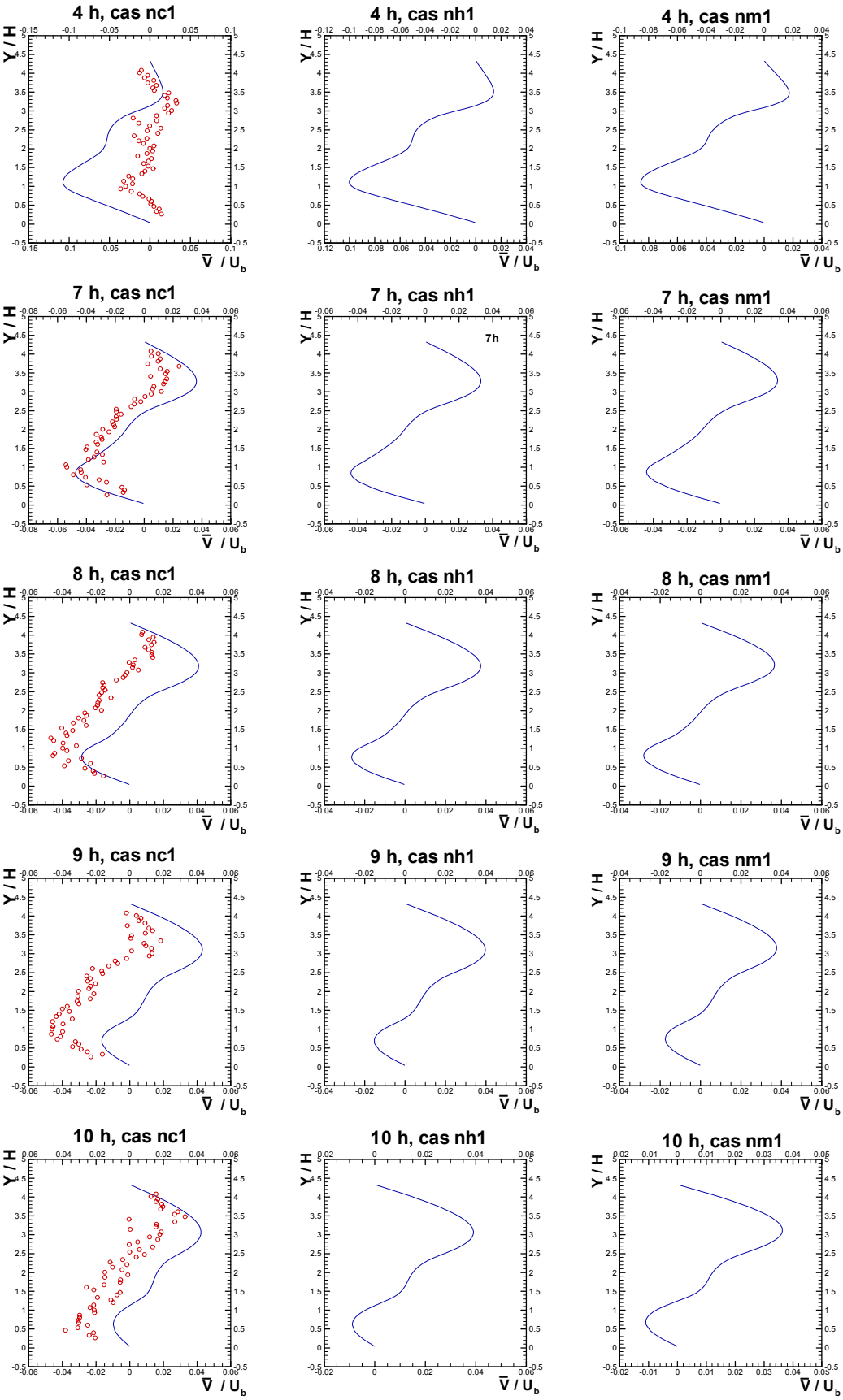

FIG. 6.8 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Trait continu) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

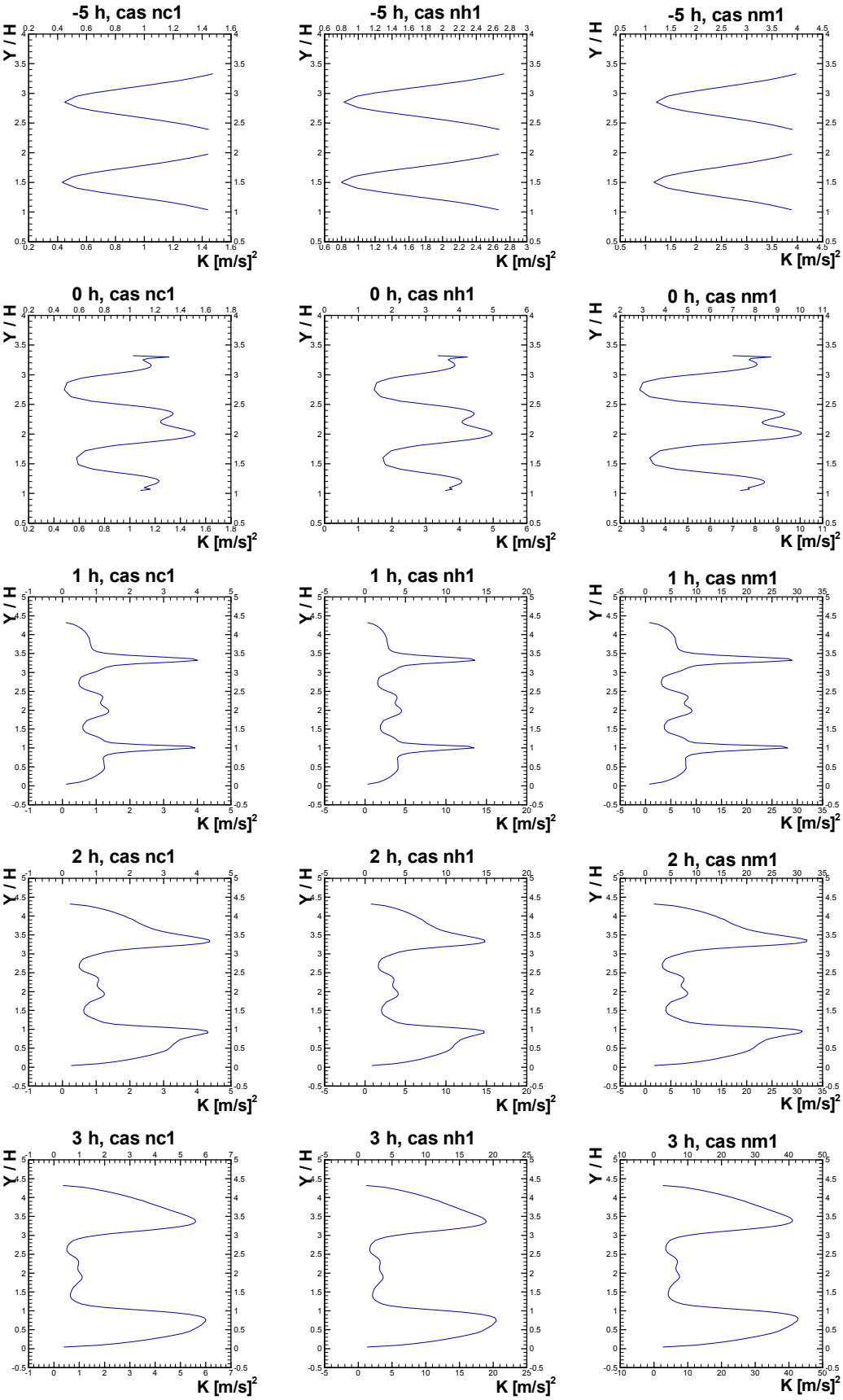

FIG. 6.9 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques de l'énergie cinétique de la turbulence.

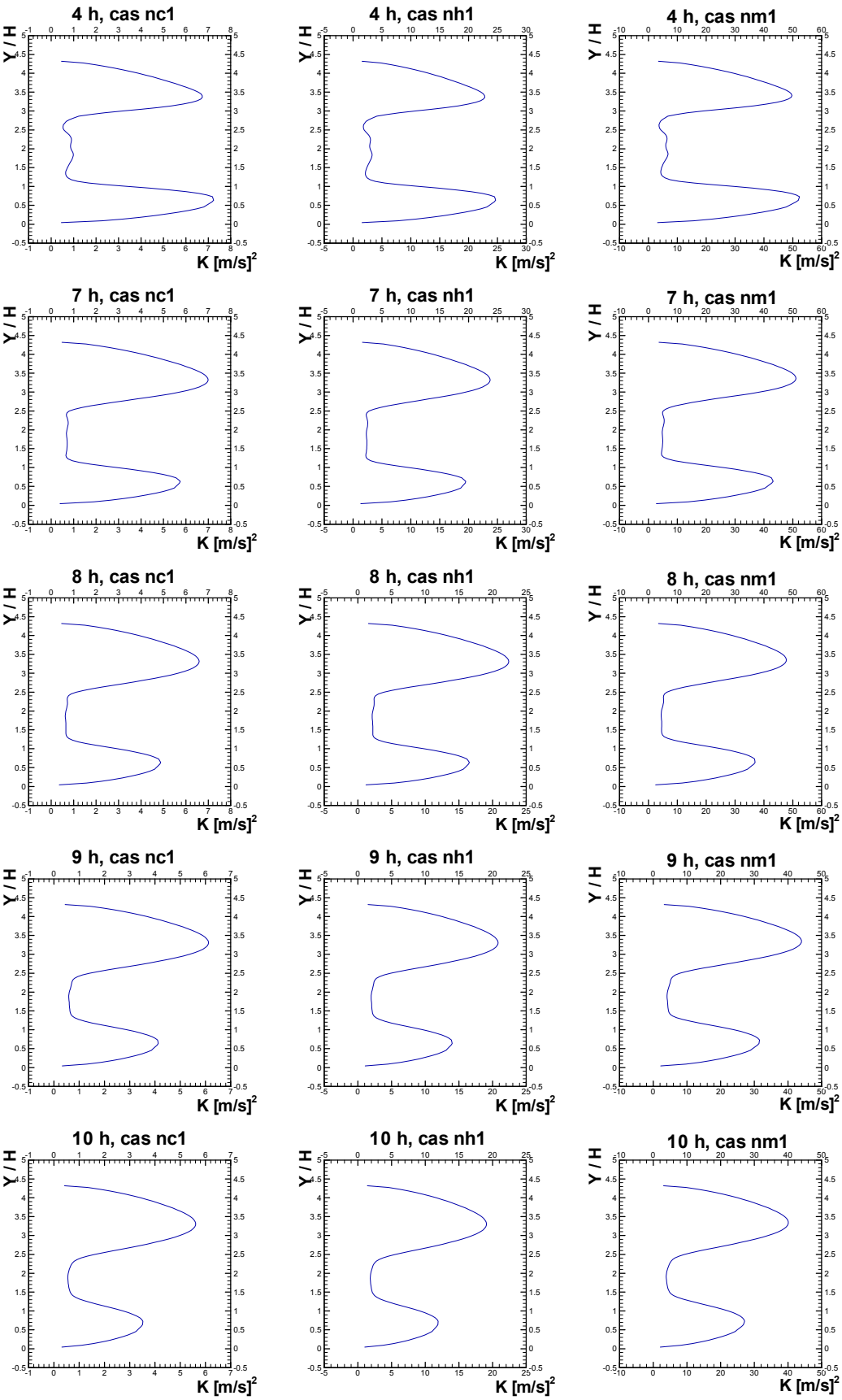

FIG. 6.10 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques de l'énergie cinétique de la turbulence.

figures 6.11 et 6.12, on retrouve bien le comportement attendu au niveau des zones de fort cisaillement, par exemple en $x = 1h$, même si l'on peut noter à ce niveau une tendance à légèrement sous-estimer l'intensité maximale du pic de fluctuations réduites obtenues expérimentalement.

C'est la tendance inverse qui est observée loin en aval de l'élargissement brusque avec, notamment pour l'écoulement le plus rapide nm_1, une sous-estimation de l'ordre de 20 % de l'intensité du maximum des fluctuations réduites. Notons que l'élargissement progressif des pics de fluctuations est très semblable entre simulation et expérience.

En revanche, la morphologie des profils de fluctuations au niveau de la zone centrale de l'écoulement, typiquement entre $y = 1,5h$ et $y = 2,5h$ apparaît beaucoup plus "plate" dans les simulations qu'elle ne l'est au niveau des profils expérimentaux. De plus, entre les trois écoulements, si la morphologie d'ensemble prévue numériquement est similaire, le niveau maximal des fluctuations réduites apparaît être toujours obtenu pour l'écoulement le plus rapide nm_1, ce qui n'est pas véritablement le cas au niveau de l'expérience, puisque c'est plutôt l'écoulement le plus lent qui présente, de peu il est vrai, le niveau de fluctuations réduites le plus élevé.

En ce qui concerne les fluctuations de la composante normale de la vitesse présentées sur les figures 6.13 et 6.14, nous ne disposons des données expérimentales que pour l'écoulement nc_1.

Dans ce dernier cas, l'accord entre simulation et expérience est très correct dans la zone proche de l'écoulement alors que plus loin en aval, le niveau des fluctuations apparaît être assez largement surestimé par les simulations. Ceci n'est en revanche pas le cas en ce qui concerne la contrainte de cisaillement moyenne dont les évolutions son présentées sur les figures 6.15 et 6.16. En $x = 1h$ et $x = 2h$, les profils numériques se superposent presque parfaitement aux profils expérimentaux et plus loin en aval, l'accord reste somme toute très satisfaisant.

La morphologie de ces profils est identique pour les deux autres écoulements, même si l'absence de données expérimentales ne permet pas de confirmer le bon comportement du modèle en ce qui concerne le cisaillement. Les résultats issus de cette comparaison simulation-expérience sont donc somme toute assez encourageants. Ils résultent toutefois d'une analyse "visuelle" des profils et donc d'une perception toujours subjective et contingente de choix d'échelles de représentation qui peuvent éventuellement "fausser" quelque peu le diagnostic à porter.

Nous allons donc maintenant présenter certaines des données issues de nos simulations associées à la composante longitudinale de la vitesse moyenne mais "traitées" de manière à permettre l'émergence éventuelle d'un comportement auto-semblable et à le comparer avec ce que Nguyen [54] avait obtenu en ayant recours à cette même procédure de recherche de propriétés de similitude.

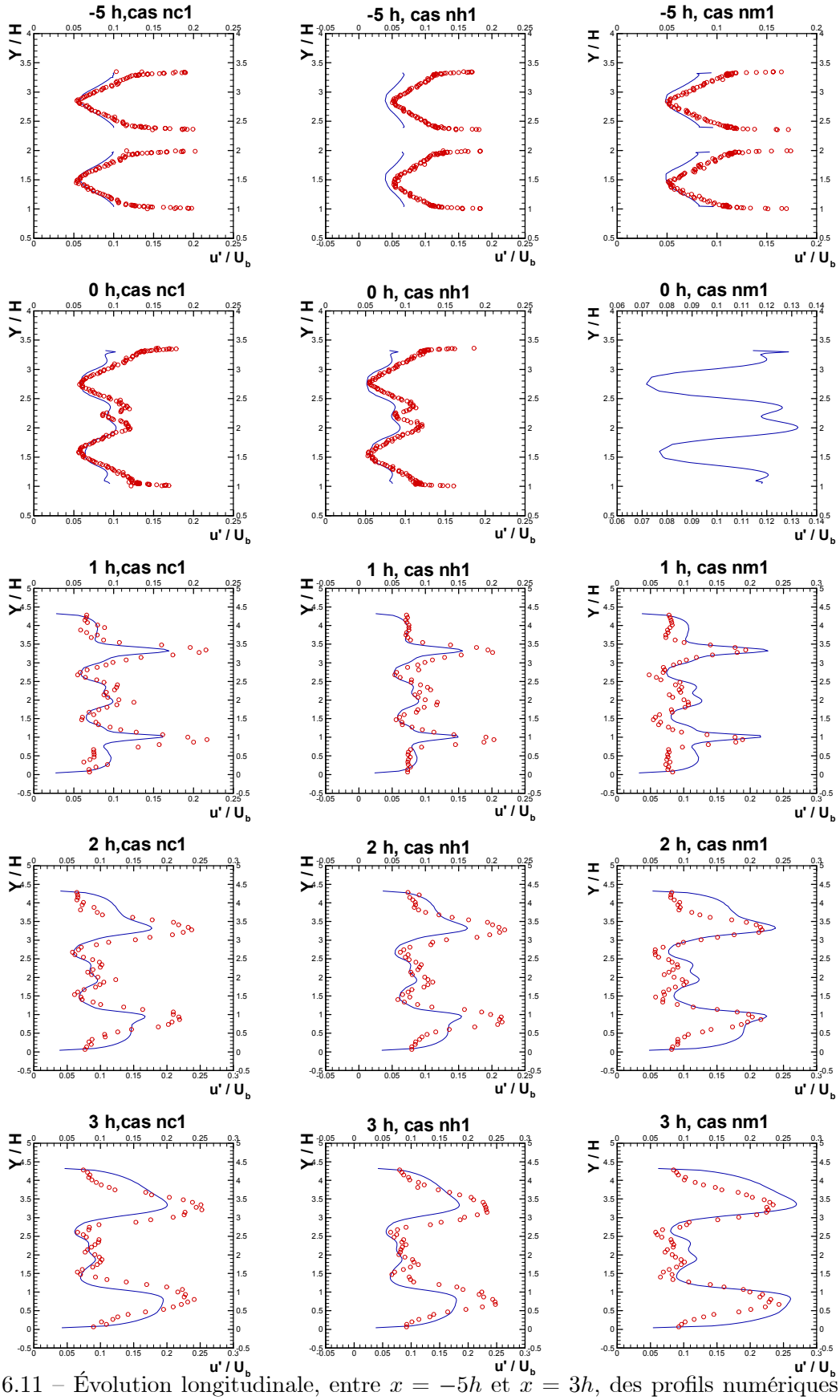

FIG. 6.11 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{u'}$ des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas nc_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas nh_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas nm_1, $U_b = 33\ m/s$).

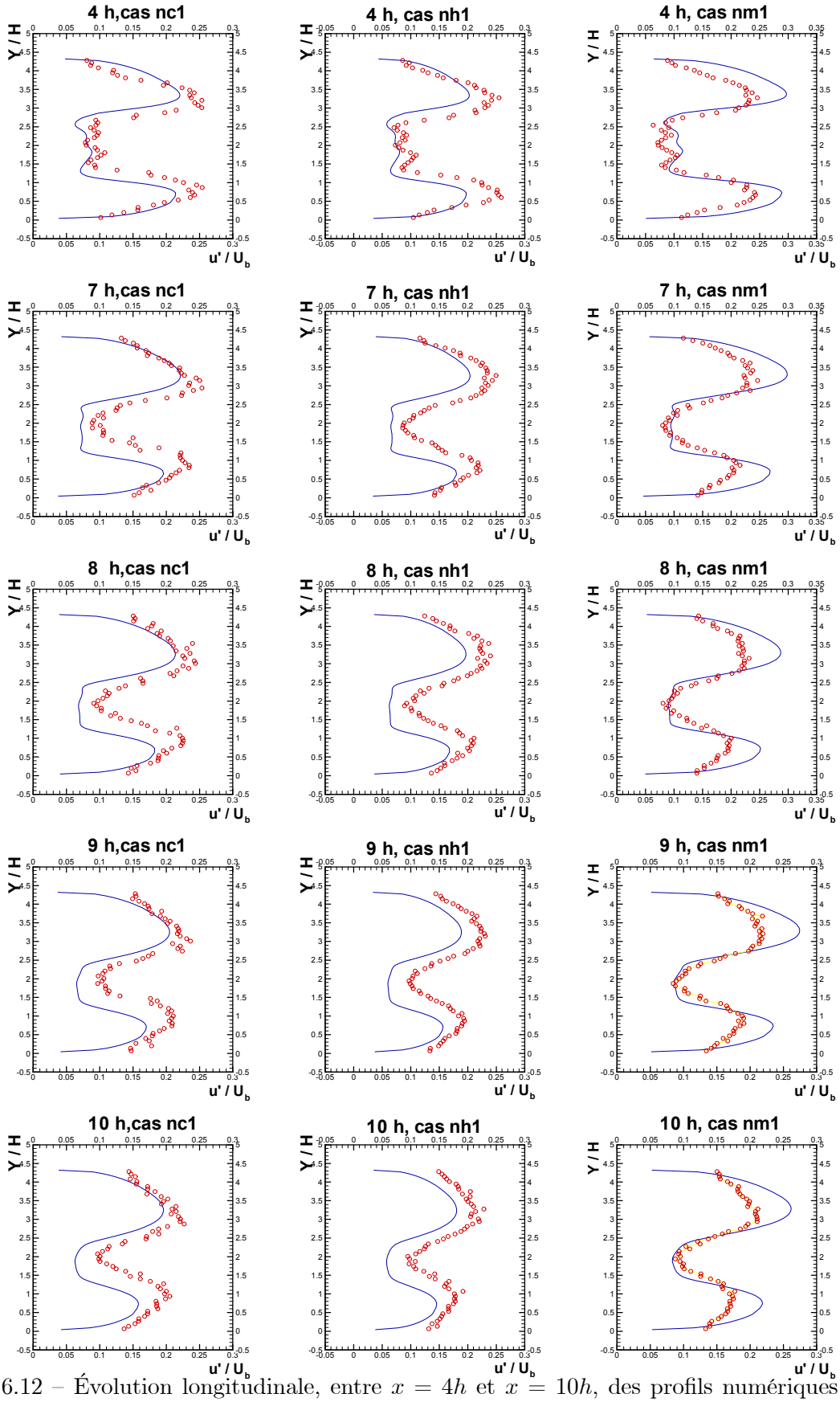

FIG. 6.12 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{u'}$ des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

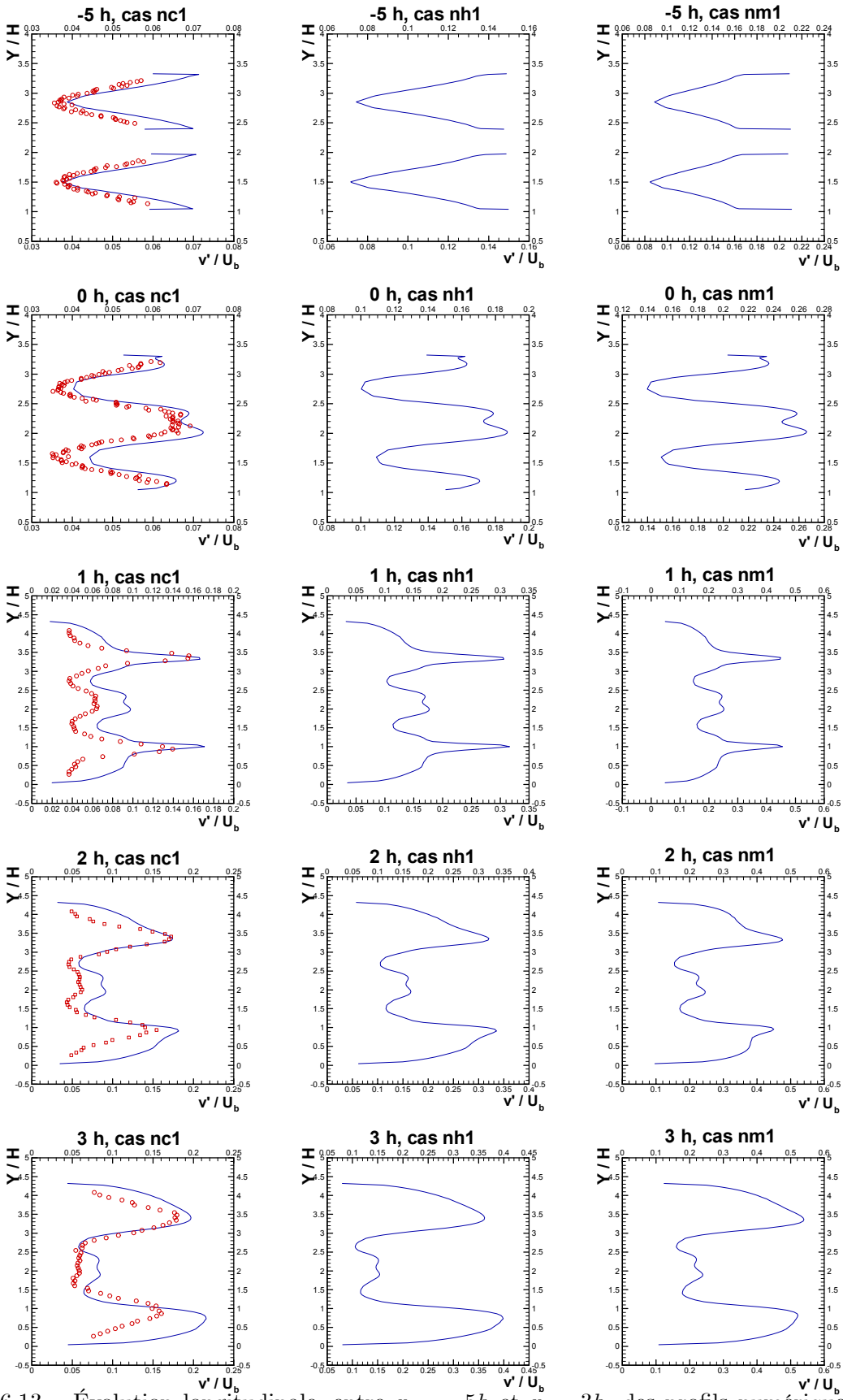

FIG. 6.13 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Trait continu) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{v'}$ des fluctuations de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas nc_1,$U_b = 11\ m/s$; Cas nh_1,$U_b = 22\ m/s$; Cas nm_1,$U_b = 33\ m/s$).

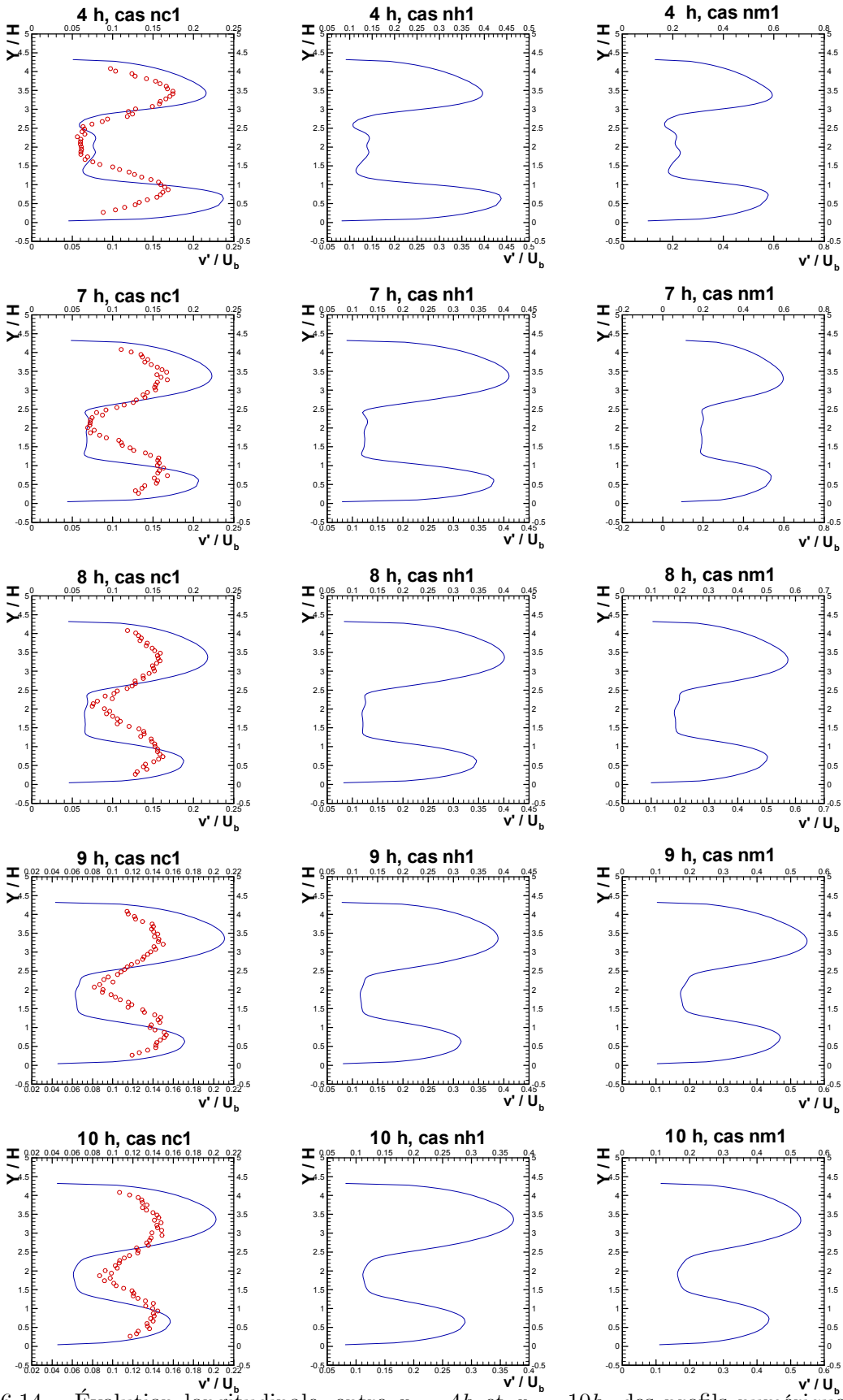

FIG. 6.14 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Trait continu) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{v'}$ des fluctuations de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas nc_1,$U_b = 11\ m/s$; Cas nh_1,$U_b = 22\ m/s$; Cas nm_1,$U_b = 33\ m/s$).

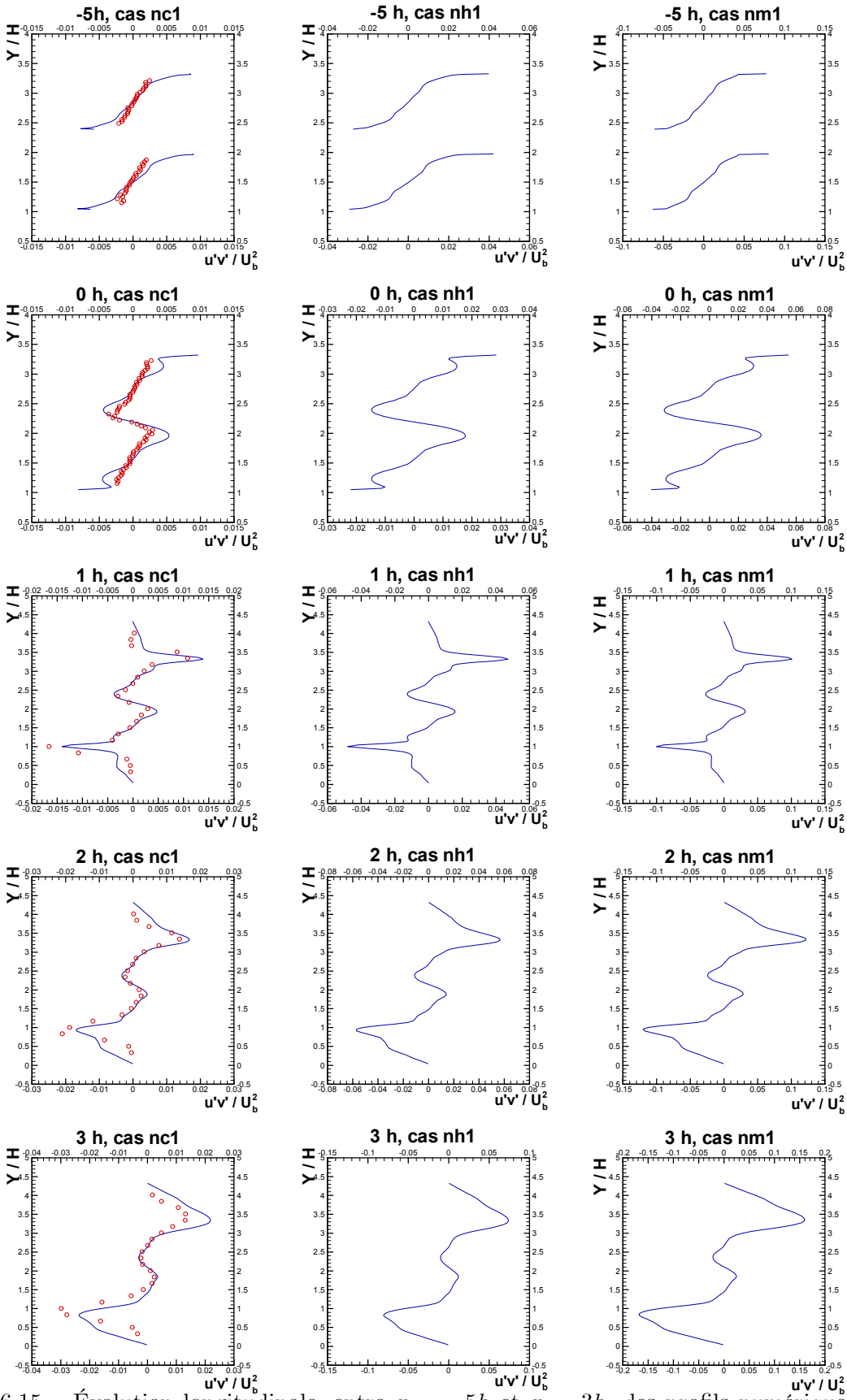

FIG. 6.15 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Trait continu) et expérimentaux (Symboles ∘) de la contrainte de cisaillement moyenne $\bar{u'v'}$ normalisée par le carré de la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

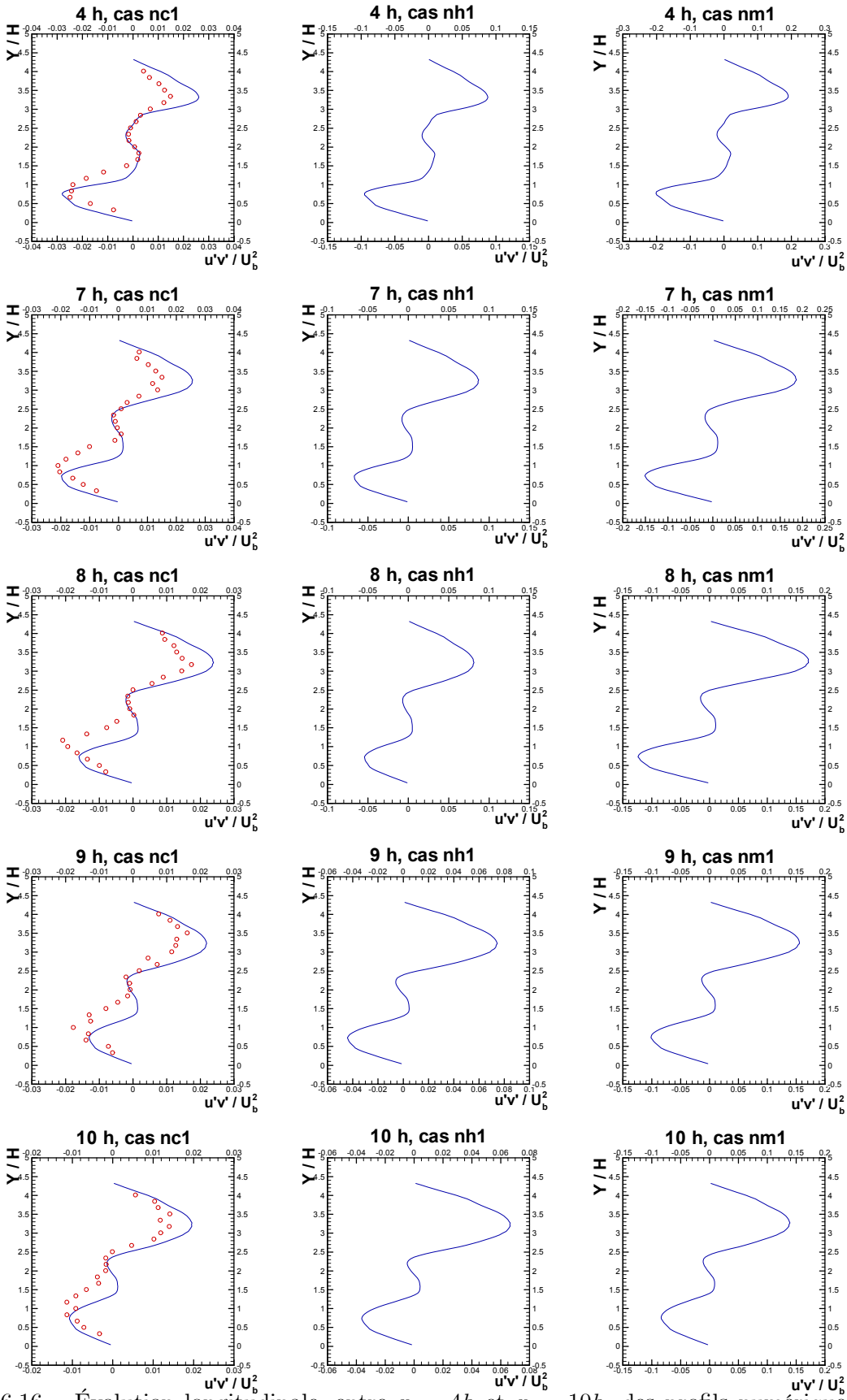

FIG. 6.16 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Trait continu) et expérimentaux (Symboles ∘) de la contrainte de cisaillement moyenne $\bar{u'v'}$ normalisée par le carré de la vitesse débitante U_b (Cas $nc_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $nh_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $nm_{1,}U_b = 33\ m/s$).

6.2.2 Étude des caractéristiques de similitude du sillage et des couches de cisaillement

Nous allons commencer ce paragraphe par nous intéresser au sillage de la plaque séparant initialement les deux écoulements d'alimentation avant de passer aux deux couches de cisaillement qui prennent naissance aux coins des deux marches.

Caractérisation du sillage

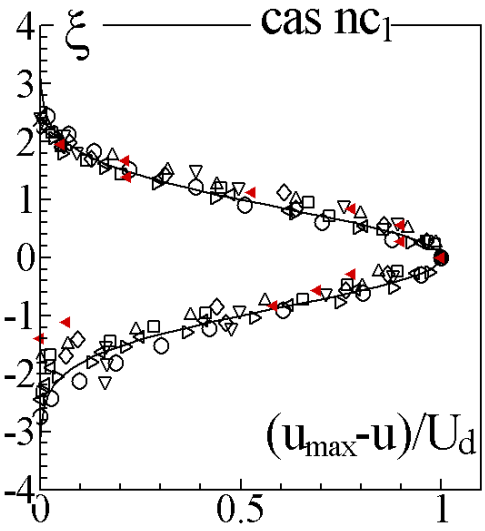

FIG. 6.17 – Sillage au sein de l'écoulement nc_1 : exemple de profils expérimentaux de la composante longitudinale de la vitesse longitudinale tracés en variable de similitude (D'après Nguyen [54]).

Le type de courbe que nous cherchons à obtenir est bien illustré par la figure 6.17 obtenue par Nguyen [54] pour l'écoulement nc_1. Sur cette figure, $u_{\max}$ désigne la vitesse u_∞ locale relevée pour chaque profil. On y voit clairement que l'ensemble des points expérimentaux représentés et qui appartiennent aux profils de vitesses obtenus de $x = 0h$ à $x = 10h$ se regroupent tous de manière très nette sur le profil de similitude prévu par la théorie. Ce type de comportement a été également observé expérimentalement pour les deux autres écoulements nh_1 et nm_1. Qu'en est'il maintenant de nos résultats numériques ? Tout d'abord, nous avons déterminé l'épaisseur de quantité de mouvement $\Theta_0 = \Theta(x = 0h)$, prise comme valeur de référence pour tracer l'évolution spatiale des différentes échelles du sillage dont l'épaisseur de vitesse moitié $\delta_{1/2}$ qui nous servira à déterminer l'abscisse de l'origine virtuelle du sillage. Les valeurs de Θ_0 que nous avons calculées sont regroupées dans le tableau 6.4 où les valeurs obtenues expérimentalement sont également rappelées. Il apparaît que les valeurs numériques sont très proches des valeurs expérimentales. À partir de là, nous sommes en position de tracer l'évolution spatiale, en fonction de $\frac{x}{\Theta_0}$, des

	Épaisseur Θ_0 de quantité de mouvement à l'élargissement brusque (mm)	
Cas	Expérimental	Numérique
nc_1	$3,68$	$3,52$
nh_1	$3,66$	$3,31$
nm_1	$3,57$	$3,58$

TAB. 6.4 – Épaisseur de quantité de mouvement au droit de l'élargissement brusque pour les écoulements inertes considérés : comparaison entre les valeurs expérimentalement déterminées par Nguyen [54] et celles obtenues à partir de nos simulations.

diverses échelles du sillage que sont l'épaisseur de quantité de mouvement réduite $\frac{\Theta}{\Theta_0}$, l'épaisseur de déplacement réduite $\frac{\delta^*}{\Theta_0}$ et l'épaisseur réduite de vitesse moitié $\frac{\delta_{1/2}}{\Theta_0}$. Pour chacun des trois écoulements étudiés, l'évolution de ces différentes quantités, obtenues à partir du traitement de nos résultats numériques est donnée sur la figure 6.18 ainsi que celle de la vitesse déficitaire $\frac{U_d}{u_{\max}}$. Nous avons également porté sur cette figure les évolutions obtenues par Nguyen [54] à partir de ses données expérimentales.

Nous observons que, jusqu'à une valeur de $\frac{x}{\Theta_0}$ de l'ordre de 40, ce qui représente une distance d'environ $4h$, le comportement des différentes échelles du sillage obtenu à partir des données numériques est en bon accord avec celui observé à partir des données expérimentales. Au delà de cette distance, l'accord n'est plus aussi bon. On observe en particulier que, sur le plan expérimental, le défaut central de vitesse tend à être résorbé dès $\frac{x}{\Theta_0} \approx 80$, alors que le défaut de vitesse issu des simulations tend à se maintenir beaucoup plus loin en aval.

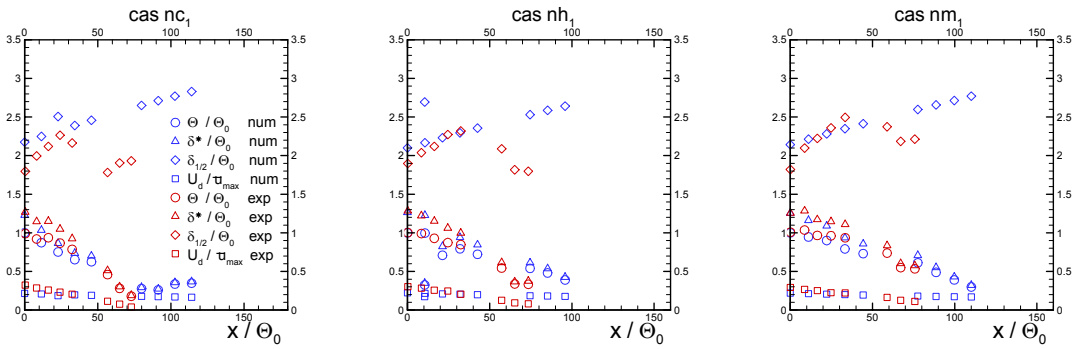

FIG. 6.18 – Sillages au sein des trois écoulements inertes : évolution longitudinale des échelles réduites caractéristiques obtenues à partir du traitement de nos résultats numériques.

Ce comportement apparaît être plus marqué pour l'écoulement le plus lent nc_1. Pour ce

dernier, la différence de comportement relevée s'accompagne logiquement d'une décroissance spatiale plus rapide des échelles spatiales obtenues expérimentalement. La cassure observée expérimentalement dans le comportement de $\frac{\delta_{1/2}}{\Theta_0}$ aux environs de $\frac{x}{\Theta_0} \approx 60$, très marquée pour l'écoulement nc_1, a été attribuée par Nguyen [54] aux effets de l'interaction entre la zone de sillage et des couches de cisaillement, ce qui semble une explication raisonnable. Nous ne pouvons que constater que la modélisation que nous avons employée ne permet pas de retrouver ce comportement. Néanmoins, et compte-tenu du bon accord observé dans la zone initiale de développement du sillage, soit jusqu'à approximativement $x = 4h$, il nous apparaît légitime de poursuivre notre traitement des données. Après avoir interpolé linéairement les points de la courbe $\frac{\delta_{1/2}}{\Theta_0} = f(\frac{x}{\Theta_0})$, et l'avoir prolongée dans la limite $\frac{x}{\Theta_0} \to 0$ afin de déterminer l'abscisse de l'origine virtuelle du sillage pour chaque écoulement, nous avons pu alors tracer ce qui représente l'objectif de ce traitement de données, à savoir la distribution de la composante longitudinale de la vitesse moyenne en fonction des variables de similitude pertinentes pour le sillage turbulent à masse volumique constante. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 6.19 où la courbe théorique a été également tracée.

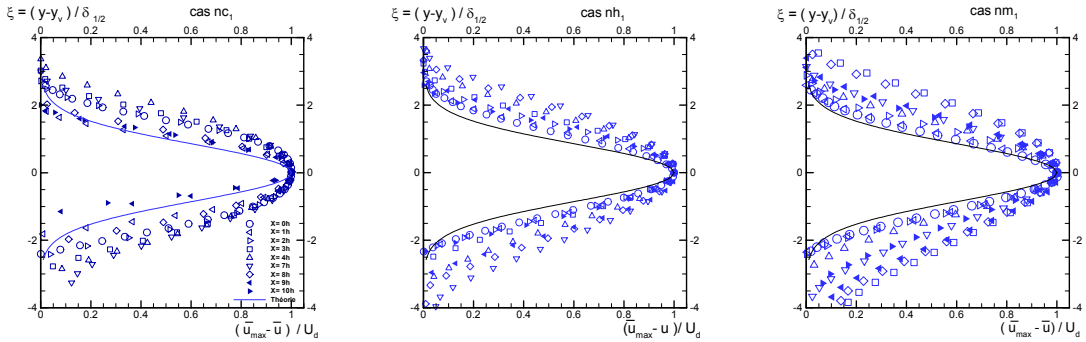

FIG. 6.19 – Sillages au sein des trois écoulements inertes simulés : profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude après traitement des résultats numériques.

Le résultat apparaît mitigé en ce sens que, bien que la morphologie d'ensemble des profils "ressemble" fortement à celle de la courbe théorique, ce qui relève somme toute dans une large mesure des changements de variables effectués, ces profils "peinent" nettement à se rassembler sur une courbe unique, cette tendance étant plus nettement observée en ce qui concerne l'écoulement nc_1. Compte-tenu du bon accord qualitatif qui avait été observé précédemment entre les profils numériques et expérimentaux de la composante longitudinale de la vitesse, et ce notamment dans la zone centrale de l'écoulement, ce constat est un peu surprenant mais en l'état actuel des traitements que nous avons effectués, c'est le seul que nous puissions établir. Voyons maintenant ce qu'il en est pour les couches de cisaillement.

Caractérisation des couches de cisaillement supérieures et inférieures

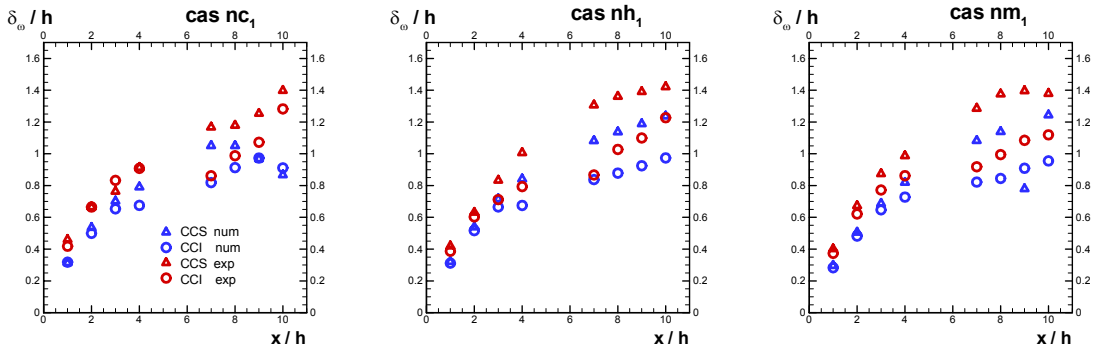

FIG. 6.20 – Couches de cisaillement au sein des trois écoulements inertes étudiés : évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité obtenue à partir du traitement de nos résultats numériques.

L'évolution spatiale de l'épaisseur de vorticité obtenue à partir de nos résultats et présentée sur la figure 6.20 apparaît être proche de celle qui a été observée expérimentalement. L'écart se creuse toutefois pour la zone plus lointaine de l'écoulement. L'évolution dans la zone proche est néanmoins très voisine d'une évolution linéaire ce qui nous permet de déterminer facilement l'abscisse de l'origine virtuelle des deux couches en prolongeant l'interpolation linéaire pour $\frac{x}{h} \rightarrow 0$. On obtient une pente $\delta_\omega^{'}$ qui varie entre $0,100$ et $0,200$, ce qui encadre la valeur de $0,178$ obtenue par Brown et Roshko [10] pour une couche de cisaillement libre mais est notablement plus faible que la valeur de $0,28$ obtenue par Pitz et Daily [59] pour la couche de cisaillement se développant derrière une marche descendante. Les valeurs obtenues par Nguyen [54] se situent quant à elles dans une plage allant de $0,135$ à $0,200$, mais elles apparaissent être toujours supérieures à celles que nous avons obtenues, ce qui conduira inévitablement à l'obtention de taux σ d'épanouissement des couches plus élevés que ceux observés expérimentalement. Le tableau 6.5 regroupe les grandeurs principales associées aux couches de cisaillement et permet une comparaison avec les données expérimentales obtenues par Nguyen [54]. On observe des disparités assez fortes entre d'une part, les caractéristiques des couches supérieures et inférieures ce qui est raisonnable vu la dissymétrie de l'écoulement moyen, et d'autre part, les valeurs numériques et expérimentales. Ces disparités sont plus particulièrement marquées, en ce qui concerne le taux d'épanouissement σ des couches pour l'écoulement nc_1, comme on pouvait s'y attendre au vu de la différence entre les pentes d'évolution de l'épaisseur de vorticité. L'évolution des différentes échelles spatiales caractéristiques des couches de cisaillement est présentée quant à elle sur la figure 6.21.

L'accord simulations-expérience est satisfaisant en ce qui concerne l'évolution de l'épaisseur de quantité de mouvement, mais pas du tout en ce qui concerne l'ordre de grandeur de l'épaisseur de déplacement. On observe ainsi que l'épaisseur de déplacement obtenue expérimentalement

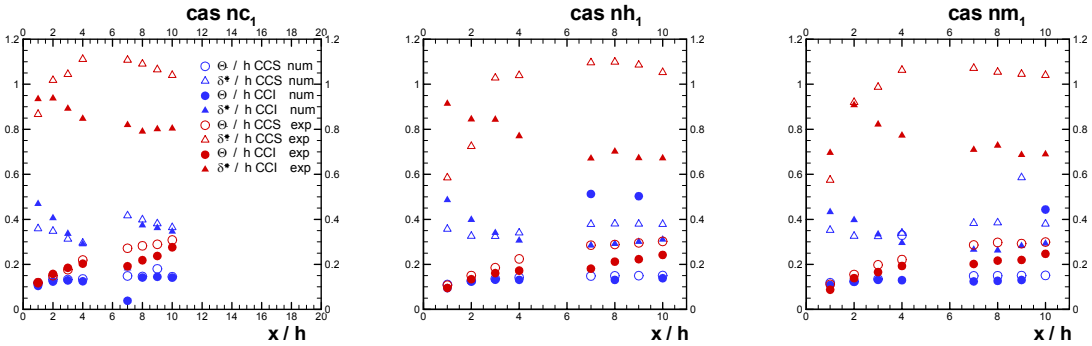

FIG. 6.21 – Propriétés des couches de cisaillement des trois écoulements inertes simulés : évolution longitudinale des différentes échelles réduites obtenue numériquement à partir de nos calculs (symboles bleus) et à partir de ses données expérimentales par Nguyen [54] (symboles rouges).

Cas	Couche de cisaillement	x_v/h		σ		δ_ω/Θ	
		Num.	Expé.	Num.	Expé.	Numé.	Expé.
nc_1	Supérieure	$-2,21$	$-2,36$	$16,113$	$12,22$	$3,979$	$4,72$
	Inférieure	$-3,23$	$-1,79$	$17,29$	$10,68$	$5,217$	$4,80$
nh_1	Supérieure	$-0,57$	$-1,17$	$9,74$	$8,96$	$4,225$	$4,81$
	Inférieure	$-0,99$	$-2,15$	$12,36$	$13,13$	$4,064$	$5,00$
nm_1	Supérieure	$-1,03$	$-1,27$	11	$9,06$	$3,48$	$4,82$
	Inférieure	$-1,52$	$-1,56$	$13,63$	$10,92$	$4,193$	$4,92$

TAB. 6.5 – Couches de cisaillement : valeurs expérimentales (D'après Nguyen [54]) et numériques de l'abscisse x_v de l'orgine virtuelle, du taux d'épanouissement σ et du rapport moyen entre l'épaisseur de vorticité et l'épaisseur de quantité de mouvement.

peut être deux fois plus importante que celle que nous avons obtenue numériquement, conduisant ainsi à un facteur de forme des couches de cisaillement expérimentales égale au double de celui des couches de cisaillement numériques. Nous n'avons pas eu la possibilité matérielle de

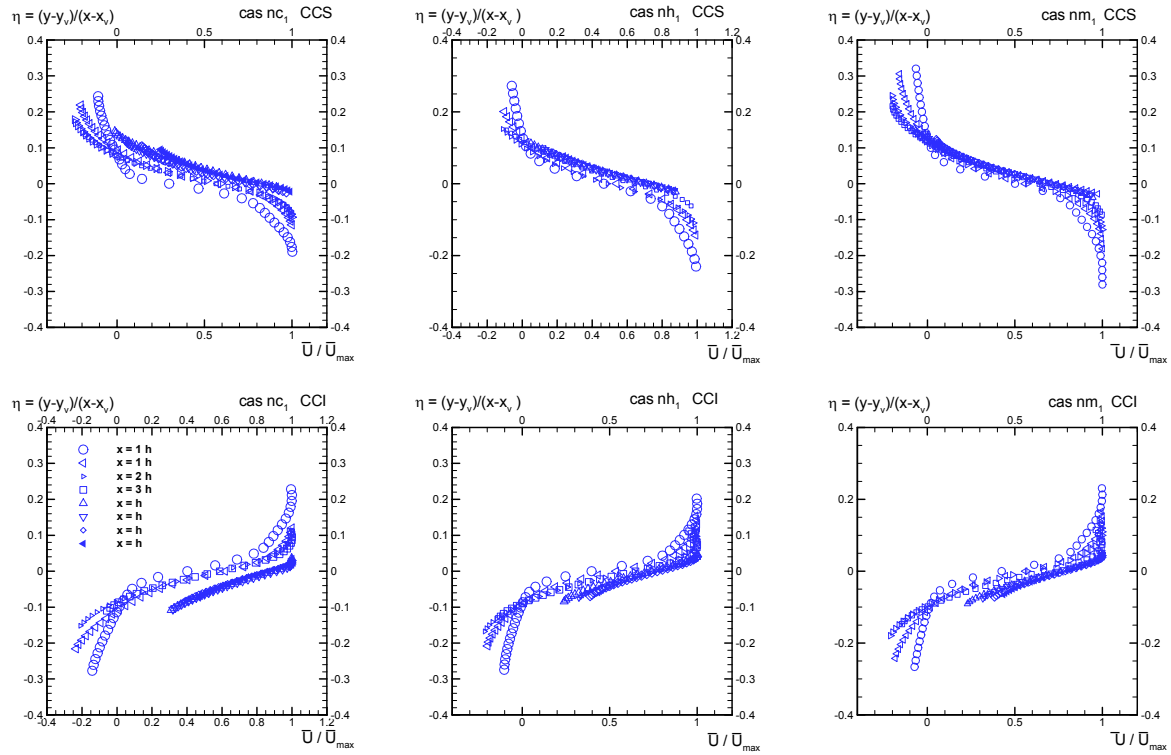

FIG. 6.22 – Couches de cisaillement au sein des trois écoulements inertes simulés : profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude.

rechercher plus avant l'origine de cette différence qui ne nous semble pas compatible avec le bon accord que nous avons observé précédemment entre les profils numériques et expérimentaux de la composante de vitesse concernée. Heureusement, cette question est sans incidence sur le tracé des profils de vitesse en fonction des variables de similitude pertinentes, ce qui nous permet donc de poursuivre plus avant. Ces tracés sont présentés sur la figure 6.22 pour les trois écoulements simulés et pour les couches de cisaillement supérieure (CCS) et inférieure (CCI). On observe un regroupement correct de l'ensemble des points autour d'un profil de similitude commun, sauf i) pour les points appartenant aux profils les plus lointains pour la couche de cisaillement inférieure de l'écoulement nc_1 simulé et ii) sur les bords des couches. À titre de comparaison, nous avons représenté sur la figure 6.23 les profils obtenus par Nguyen [54] pour ce même écoulement. On y remarque que le regroupement des points expérimentaux autour du profil de similitude est encore meilleur que ce qui est observé pour les points issus de nos simulations numériques, quoique ici, l'écart observé entre résultats issus des simulations et résultats expérimentaux est bien moindre que celui relevé pour les sillages. De cette recherche d'un com-

portement auto-semblable des sillages et des couches de cisaillement présents au sein des trois écoulements inertes calculés, il ressort donc que c'est au niveau des couches de cisaillement que nous obtenons le résultat le plus convaincant, notamment en ce qui concerne la confrontation avec les résultats expérimentaux. En ce qui concerne la zone de sillage, les résultats apparaissent moins satifaisants, notamment lorsqu'on les confronte avec ceux issus de la simple comparaison des profils numériques et expérimentaux pour cette même zone. Finalement, pour compléter au

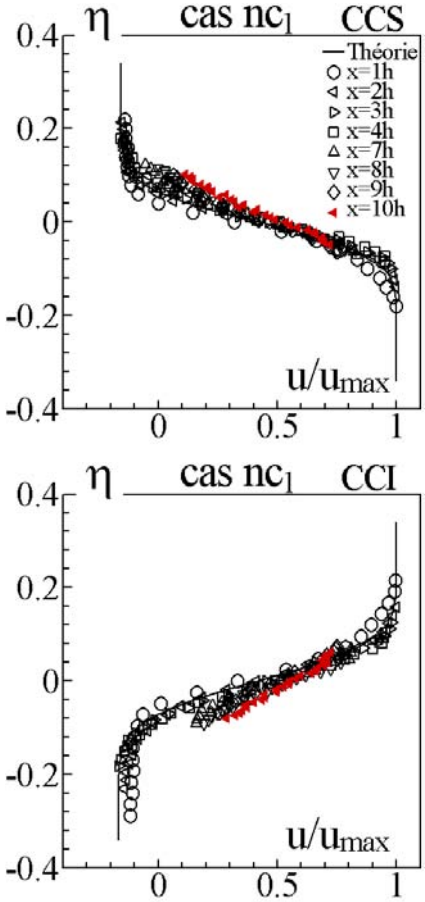

FIG. 6.23 – Couches de cisaillement au sein de l'écoulement nc_1 : exemple de profils expérimentaux de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude (D'après Nguyen [54]).

mieux le panorama que nous avons dressé, qui présente des points positifs et négatifs quant à la qualité de prévision associée à nos simulations, il nous semble que l'estimation quantitative de l'écart entre résultats de calcul et résultats expérimentaux est la manière la plus objective pour traduire la qualité de précision de nos simulations. C'est ce que nous présentons dans la section suivante.

6.3 Écart quantitatif entre résultats de simulation et résultats expérimentaux

Le tableau 6.6 regroupe la valeur de l'estimation d'écart simulations-expériences que nous avons calculée profil par profil pour toutes les variables pour lesquelles nous disposions des données nécessaires. Avec un tel estimateur, l'objectif est de tendre vers 0 pour toutes les grandeurs et les profils concernés. Nous n'en sommes évidemment pas là. On obtient ainsi par exemple, des valeurs d'écart de l'ordre de 6 % de la vitesse débitante pour la composante longitudinale de la vitesse moyenne. Pour un écoulement donné, à la question, "est-ce bon ou mauvais ?", il n'est pas possible de répondre en n'ayant utilisé qu'un seul type de modélisation ou de méthode numérique, puisque l'intérêt premier de recourir à de tels estimateurs est d'observer leur sensibilité à un changement de modèle physique, de résolution de maillages ou de méthode numérique. En revanche, dans le cadre de l'utilisation d'un modèle physique et d'une méthode numérique donnés, comme dans notre cas, ces estimateurs sont précieux afin de déterminer si tel écoulement particulier est calculé de manière plus précise que tel autre dans telle zone. Par

Écart entre résultats numériques et expérimentaux en % de U_b pour $\bar{U}, \bar{V}, \overline{u'}, \overline{v'}$ et de U_b^2 pour $\overline{u'v'}$												
		Canal		Chambre de combustion								
		Sup.	Inf.	Profils à l'abscisse $x =$								
		$-5h$		$0h$	$1h$	$2h$	$3h$	$4h$	$7h$	$8h$	$9h$	$10h$
$\bar{U}$	nc_1	2,3	3,4	5,4	5,5	4,8	5,6	6,0	7,0	6,0	6,1	6,1
	nh_1	2,3	2,8	5,4	6,7	6,1	6,3	6,3	5,0	5,0	5,0	4,7
	nm_1	3,0	2,9	–	6,2	5,4	5,3	5,0	4,5	4,5	4,7	4,6
$\bar{V}$	nc_1	1,1	0,8	0,6	1,9	3,6	4,8	4,8	1,4	2,3	3,2	2,1
u'	nc_1	1,9	1,6	1,4	1,9	3,0	3,4	3,5	3,8	4,0	4,0	3,9
	nh_1	3,4	3,5	1,6	1,9	2,8	3,5	3,7	4,3	4,6	4,6	4,5
	nm_1	1,8	1,8	–	2,4	3,1	3,8	4,1	3,7	3,4	3,0	3,0
v'	nc_1	0,6	0,5	0,6	2,7	2,8	3,4	4,1	4,0	4,0	4,0	3,5
$u'v'$	nc_1	0,1	0,1	0,1	0,2	0,3	0,5	0,6	0,7	0,5	0,5	0,4

TAB. 6.6 – Simulation numérique des écoulements inertes : écart quantitatif entre nos résultats de calcul et les données expérimentales de Nguyen [54].

exemple, on observe que pour la composante longitudinale de la vitesse moyenne ainsi que pour les fluctuations associées, nos calculs prévoient les données expérimentales avec une précision inférieure à 8 % (relative à la vitesse débitante d'un canal d'alimentation) pour tous les écoulements simulés. Les chiffres du tableau 6.6 fourniront donc, nous l'espérons, une "référence" qui

pourra être utilement employée par d'autres chercheurs afin de leur permettre de montrer, de manière claire, les avantages éventuels apportés par leur stratégie de modélisation des écoulements concernés. Quant à nous, ces estimations seront utiles pour montrer de manière claire, qu'en ce qui concerne les écoulements réactifs simulés, la qualité de la prévision des résultats expérimentaux est nettement moins bonne que ce qui est obtenu pour les écoulements inertes, indiquant par la même l'ampleur initiale de la marge de progression qu'il reste à réaliser.

Chapitre 7

Écoulements réactifs

7.1 Procédures d'initialisation et d'allumage

Par rapport aux écoulements inertes présentés au chapitre précédent et compte-tenu des propriétés du modèle de combustion CLE utilisé, nous avons donc trois équations d'évolution supplémentaires à résoudre pour la fraction de mélange moyenne $\tilde{Z}_f$, sa variance $\widetilde{Z_f''^2}$ et la fraction massique moyenne de fuel $\widetilde{Y_f}$. Dans le cas des écoulements à richesse constante c_1, h_1 et m_1, la résolution de l'équation d'évolution de $\tilde{Z}_f$ et de $\widetilde{Z_f''^2}$ est superflue puisqu'en tout point de l'écoulement réactif moyen on a $\tilde{Z} = Z_f^0$ et $\widetilde{Z_f''^2} = 0$ où Z_f^0 désigne la fraction de mélange injectée au niveau de l'entrée des deux canaux d'alimentation i.e. en $x = -5h$. Dans tous les cas et pour les variables qui leur sont communes, les conditions initiales des simulations des écoulements réactifs sont choisies à partir des résultats obtenus pour les écoulements inertes de débit d'alimentation identique. Pour les écoulements à richesse constante c_1, h_1 et m_1, la fraction massique de fuel est initialisée dans tout le domaine à la valeur Y_f^0 injectée en entrée puis la procédure d'allumage est réalisée. En revanche, pour les écoulements à richesse variable c_2 et c_3, nous avons interposé, avant la séquence d'allumage, une étape préalable de calcul destinée à permettre l'établissement de la couche de mélange scalaire entre les deux écoulements de richesse différente. Une fois que la simulation associée à cette étape a convergé, nous procédons ensuite à la séquence d'allumage.

Cette séquence d'allumage est réalisée dans deux régions placées symétriquement par rapport à l'axe de symétrie de la veine d'essai comme l'indique le schéma de la figure 7.1. Ces deux zones, rectangulaires, ont une longueur de 12 mm et une hauteur de 1 mm. L'allumage proprement dit consiste alors à imposer dans ces deux zones et uniquement pendant un pas de temps, une valeur de $\widetilde{Y_f}$ égale à 80 % de la valeur présente initialement. Ce faisant, le terme de production chimique moyen devient non nul et l'on amorce alors une évolution de l'ensemble des grandeurs qui décrivent le système thermochimique. Pour être brutal et non conservatif au sens où l'on perturbe localement les équilibres initiaux des équations de bilan, ce type d'allumage n'en est

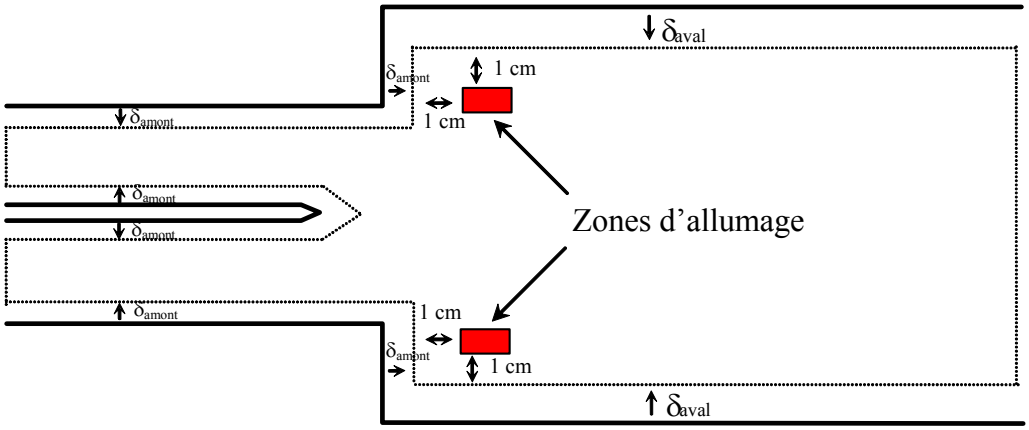

FIG. 7.1 – Simulation des écoulements réactifs sur ORACLES : détail de la position des deux zones d'allumage.

pas moins très simple à mettre en oeuvre. Le choix de l'emplacement des zones d'allumage se révèle plus délicat, et c'est sur la base d'une procédure de type "essai-erreur" que nous avons déterminé les positions reportées sur la figure 7.1. Il reste enfin à choisir la valeur de la constante C_{CLE} du modèle de combustion. Nous devons indiquer ici que les simulations que nous avons effectuées se sont révélées être particulièrement sensibles, en terme de stabilité, au choix de cette valeur. En d'autres termes, une faible variation de la valeur de C_{CLE} pouvait nous faire passer d'une simulation divergente à convergente et vice versa. Ainsi, à partir de la valeur dite standard $C_{CLE} = 4,4$ indiquée dans le manuel du programme N3SNatur, nous avons retenu comme premier critère de choix de la valeur de cette constante celui de la possibilité de mener un calcul jusqu'à son terme avec une convergence satisfaisante. Comment avons-nous alors procédé lorsque nous étions en présence d'une situation de calcul instable avec une valeur donnée de C_{CLE} ? Dans ce cas, nous avons d'abord observé les caractéristiques d'évolution de l'écoulement "instable" simulé en essayant de repérer un phénomène de type "retour de flamme" ou de type "soufflage de la flamme". Dans le premier cas, la pathologie associée se caractérise par une remontée de la zone de combustion dans les canaux d'alimentation et dans le second cas, par une "évacuation" de la zone de combustion vers la sortie de la veine d'essai. Ensuite, nous avons utilisé les résultats issus de l'analyse des propriétés de propagation des zones de combustion à richesse constante calculées sur la base du modèle CLE telles que nous les avons décrites au chapitre 3 consacré à la description des modèles physiques employés. Dans les cas où nous avons observé un comportement de type "retour de flamme", que nous avons associé formellement à une vitesse de flamme turbulente trop importante, nous avons alors diminué la valeur de C_{CLE}, puisque nous savons que la vitesse de flamme turbulente est, en théorie et à richesse constante, une fonction croissante proportionnelle, à propriétés de turbulence incidente données, à $\sqrt{C_{CLE}}$.

Dans le cas contraire, en présence d'un comportement de type "soufflage de flamme", nous avons augmenté la valeur de C_{CLE}. En ce qui concerne les écoulements à richesse constante, c'est pour l'écoulement incident c_1, le plus "lent", que nous avons observé un phénomène de retour de flamme qui nous a conduit à devoir réduire la valeur de C_{CLE} de $4,4$ à $3,5$ soit une réduction d'environ 12 % de la vitesse de flamme turbulente théorique. Pour les écoulements plus rapides h_1 et m_1, nous avons observé en revanche une phénomène de soufflage de flamme lorsque nous utilisions la valeur standard de $4,4$ et nous avons alors augmenté la valeur de C_{CLE} jusqu'à 6, ce qui correspond à une augmentation de la vitesse de flamme turbulente théorique d'environ 15 %. Pour les deux écoulements à richesse variable c_2 et c_3 , nous avons modifié la valeur "standard" de C_{CLE} uniquement pour l'écoulement c_2 pour lequel nous avons repris la valeur utilisée pour le cas c_1, soit $C_{CLE} = 3,5$. Les maillages utilisés sont les mêmes que ceux retenus pour les écoulements inertes et les valeurs des paramètres principaux relatifs aux calculs sont données sur le tableau 7.1. Tous nos calculs on été réalisés avec les mêmes procédures d'intégration que pour les écoulements inertes, la seule spécificité liée au calcul des écoulements réactifs tient dans le recours à l'utilisation du limiteur de pente de type *min-mod* dans le cadre de l'évaluation des flux convectifs.

Paramètres de calcul					
Cas	β	CFL	Pas de temps (s)	Valeur minimale atteignable du résidu de vitesse	Nombre d'iterations correspondant
c_1	$0,033$	$0,8$	$5,41E-07$	$1,12E-06$	$2,68E+06$
h_1	0.067	1	$1,41E-07$	$1,30E-07$	$1,12E+06$
m_1	$0,1$	1	$4,33E-07$	$5,39E-07$	$1,27E+06$
c_2	$0,033$	1	$7,37E-07$	$1,51E-05$	$5,00E+05$
c_3	$0,033$	1	$6,74E-07$	$1,78E-06$	$5,00E+05$

TAB. 7.1 – Paramètres de calcul utilisés pour la simulation des écoulements réactifs.

Le volume des données obtenues avec nos simulations étant encore plus important que celui correspondant aux calculs des écoulements inertes, nous avons choisi d'organiser la présentation des résultats en commencant par les propriétés d'ensemble des écoulements telles que les champs des différentes grandeurs les révèlent avant de poursuivre par la confrontation résultats de calcul - résultats expérimentaux profil par profil. Pour les écoulements à richesse constante, c_1, h_1 et m_1, nous avons de plus effectué une recherche des propriétés éventuelles d'autosimilarité de manière à les comparer avec ce que Nguyen [54] avait obtenu pour ces écoulements. Enfin, nous

conclurons ce chapitre avec le commentaire du tableau des écarts quantitatifs entre résultats expérimentaux et résultats de nos simulations numériques.

7.2 Influence d'une augmentation de débit à richesse constante : écoulements à richesse constante c_1, h_1 et m_1

7.2.1 Propriétés d'ensemble des champs moyens

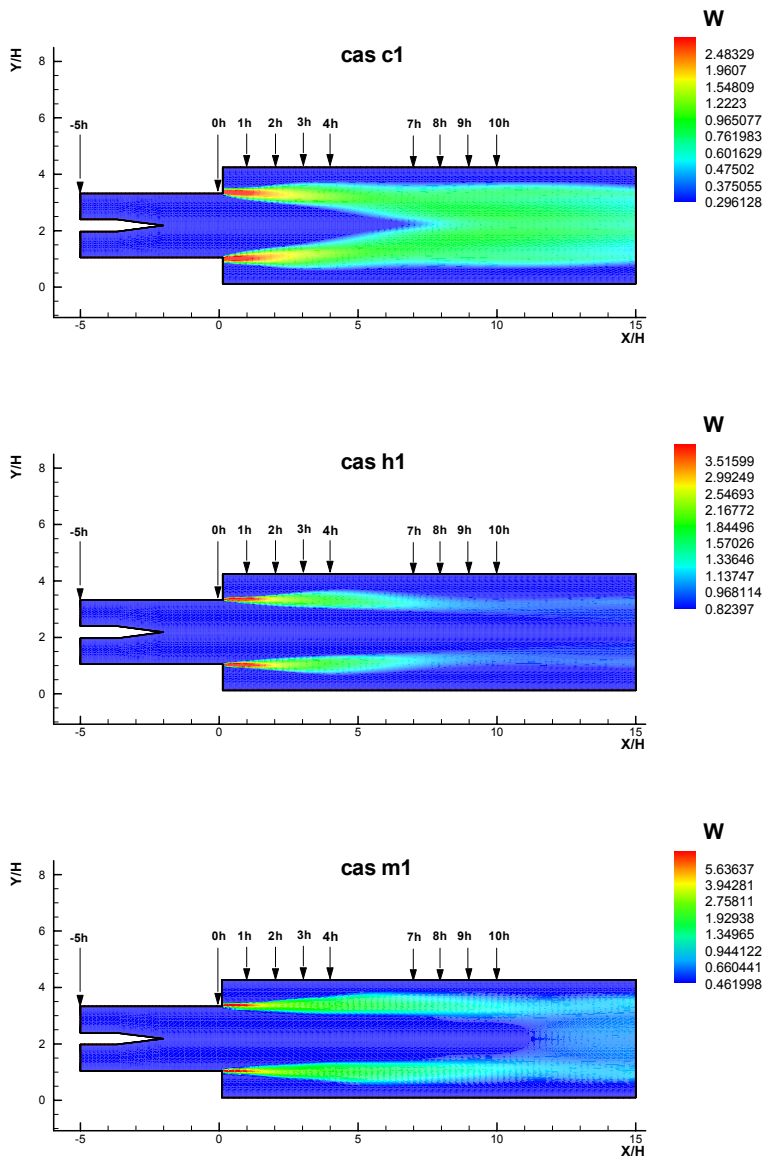

FIG. 7.2 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ du terme de production chimique moyen (en $kg/m^3/s$).

C'est avec les champs du terme de production chimique moyen et de la température moyenne que l'on saisit d'emblée la structure moyenne des écoulements réactifs simulés. Les champs du terme de production chimique moyen sont donnés sur la figure 7.2. On remarque que les deux

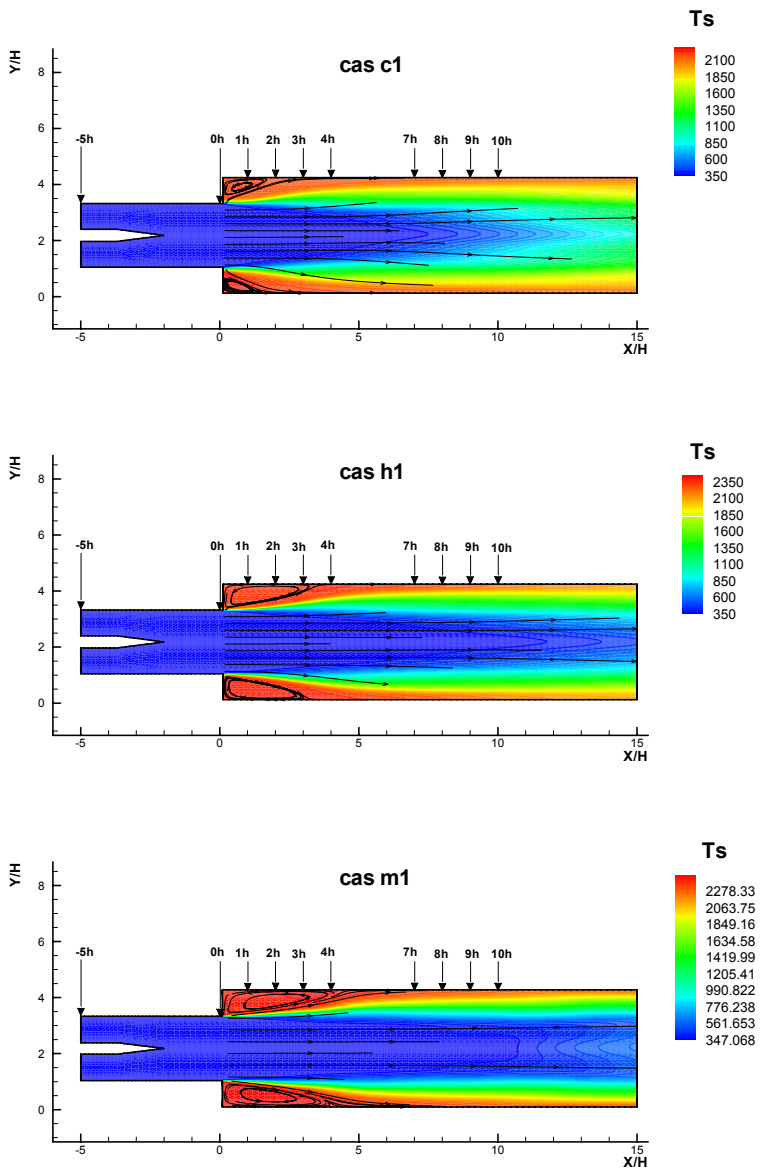

FIG. 7.3 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de la température moyenne (en Kelvin).

zones de combustion sont accrochées, comme on l'observe expérimentalement, au niveau de la zone initiale de développement des couches de cisaillement. C'est seulement pour l'écoulement le plus lent c_1 que les deux zones de réaction moyennes sont suffisamment inclinées vers l'axe de la veine d'essai pour qu'elles puissent se rejoindre et donner naissance une zone de réaction

unique, à partir de $x = 12\ h$ environ. Pour les deux autres écoulements, plus rapides, les deux fronts moyens ne se rejoignent pas vraiment, du moins avec des niveaux du taux de réaction suffisamment importante. Cette morphologie des fronts moyens de réaction entraîne logiquement, comme le montre la figure 7.3, la présence d'un "dard" de température moyenne à la température des gaz frais qui pénètre d'autant plus loin au sein de la veine d'essai que le débit d'alimentation est important. L'angle moyen de cette couche thermique par rapport à la direc-

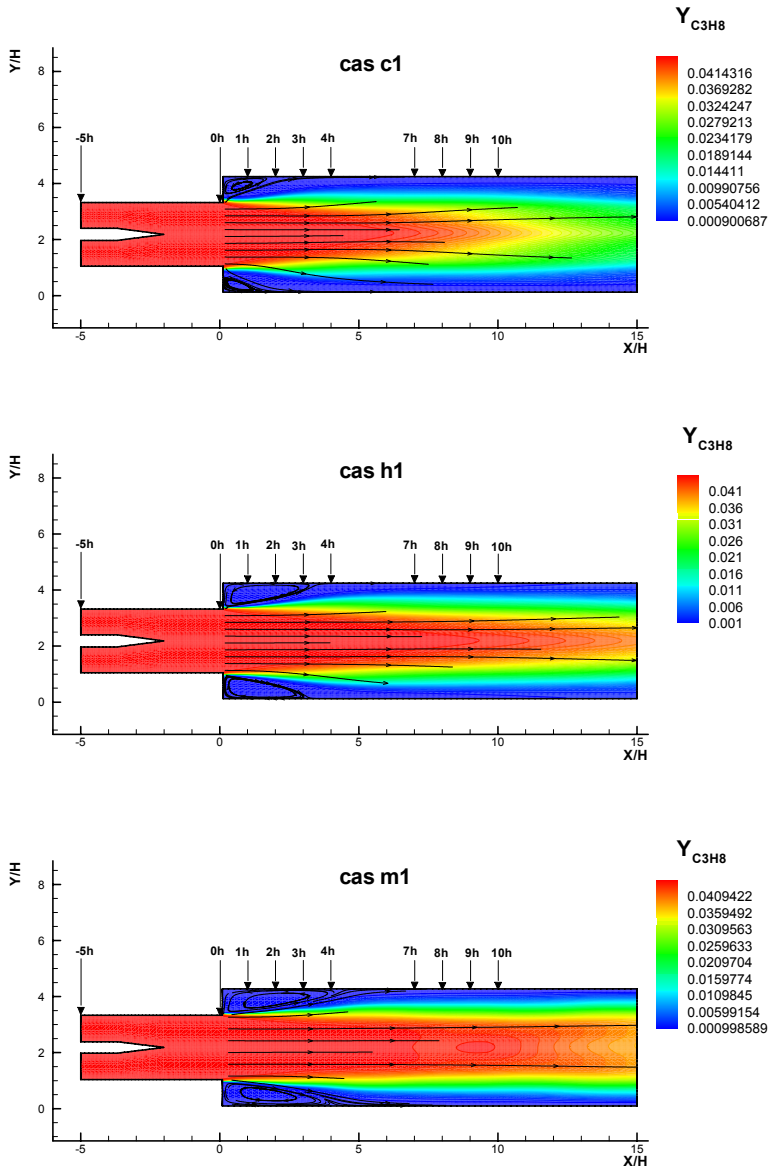

FIG. 7.4 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de la fraction massique de propane.

tion des écoulements incidents est d'autant plus faible que le débit est important, et ce n'est

que pour l'écoulement le plus lent, c_1, que l'on observe, comme pour le terme de production chimique moyen, la rencontre des deux couches thermiques avant le plan de sortie du domaine de calcul. On distingue également sur les champs de température moyenne, la présence de deux poches à haute température stabilisées juste au niveau des deux marches. Plus loin en aval, le

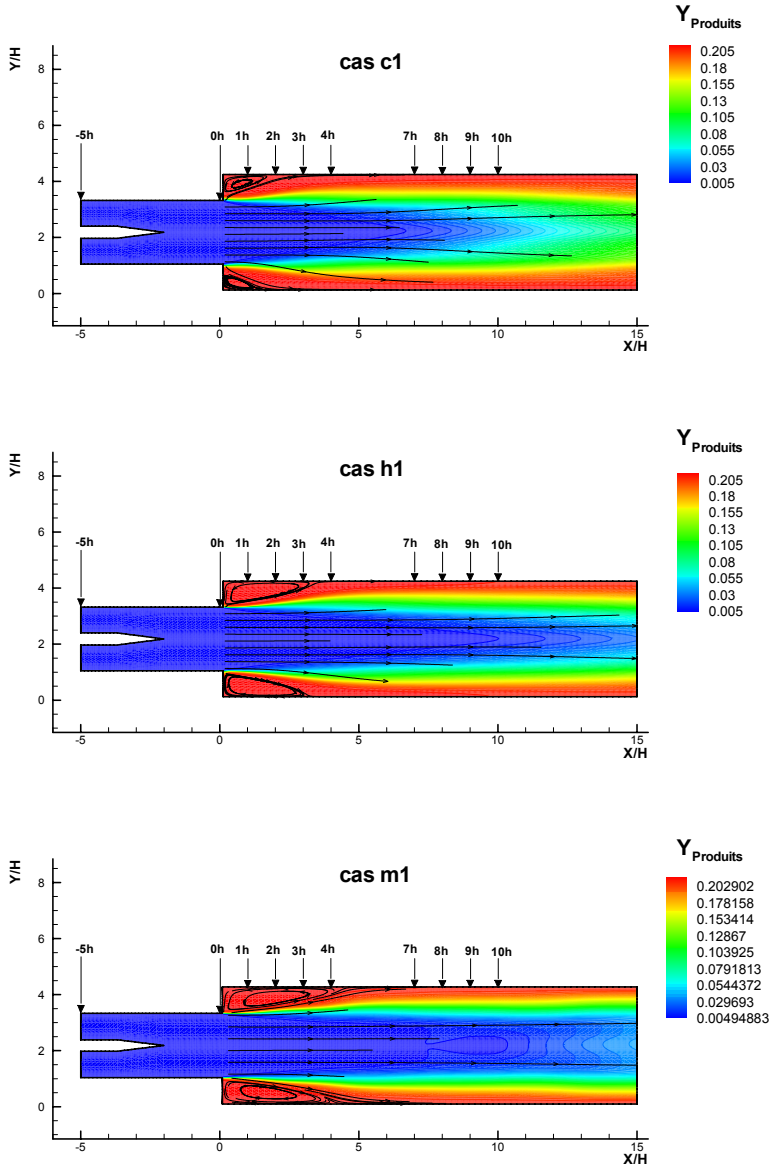

FIG. 7.5 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de la fraction massique moyenne des produits de combustion (dioxyde de carbone et eau).

champ de température se caractérise par la présence d'une couche limite thermique pour laquelle la zone des plus fortes températures se situent au niveau des frontières pariétales du domaine de calcul. On retrouve logiquement cette même morphologie de champ en ce qui concerne la

fraction massique moyenne de propane représenté sur la figure 7.4 ou de celui des produits de combustion qu'illustre la figure 7.5. On peut noter que, pour toutes ces grandeurs scalaires, les champs moyens qui leur correspondent sont quasi-symétriques par rapport à l'axe central de la veine. L'inspection du champ de la composante longitudinale de la vitesse moyenne confirme ce fait, puisque on observe deux zones de recirculation moyennes, suivies d'une zone intermédiaire assez homogène, elle même suivie, à partir d'environ $x = 10\ h$ par une zone qui se caractérise par la présence de deux zones pariétales et symétriques de fortes vitesses qui s'épaississent rapidement. Les valeurs de cette composante de la vitesse moyenne peuvent atteindre jusqu'à près de quatre fois celle de la vitesse débitante calculée sur les canaux d'alimentation, soit par exemple de l'ordre de 130 m/s pour l'écoulement m_1 au voisinage du plan de sortie $x = 15\ h$. La morphologie du champ de la composante normale de la vitesse moyenne confirme bien, de par son antisymétrie quasi-parfaite par rapport à l'axe de la veine d'essai, la structure d'ensemble symétrique du champ de la vitesse moyenne et du champ des grandeurs scalaires associés à la description aérothermochimique des écoulements.

Cas	Longueur des zones de recirculation			
	Inférieure		**Supérieure**	
	Expérimental (Nguyen [54])	Numérique	Expérimental (Nguyen [54])	Numérique
c_1	$2,3h$	$1,5h$	$2,3h$	$2h$
h_1	$3,4h$	$3,2h$	$3,5h$	$3,4h$
m_1	$4,2h$	$4,2h$	$4,9h$	$4,4h$

TAB. 7.2 – Longueur des zones de recirculation des écoulements réactifs à richesse constante simulés.

Nous avons déterminé, comme pour les écoulements inertes, les longueurs des zones de recirculation moyennes supérieure et inférieure et nous les avons comparées à leurs homologues obtenues expérimentalement. On observe tout d'abord que l'accord simulations-expériences est assez satisfaisant avec moins de 10 % d'écart relatif dans tous les cas sauf pour la zone de recirculation inférieure de l'écoulement c_1 pour lequel cet écart est de l'ordre de 35 %. Nous notons également que la symétrie de l'écoulement moyen rapportée précédemment se retrouve, au niveau des résultats numériques, dans une fourchette d'écart relatif entre les longueurs des zones de recirculation moyennes inférieure et supérieure de l'ordre de 25 %.pour l'écoulement c_1 et de moins de 8 % pour les deux autres. Ainsi, la modélisation employée permet bien de retrouver qualitativement et quantitativement en ce qui concerne l'extension des zones de recirculation la resymétrisation de l'écoulement moyen observée expérimentalement. Nous allons voir maintenant, que, si cette réorganisation d'ensemble de l'écoulement associée à la présence de combustion dans la veine d'essai est bien capturée par nos simulations, la confrontation, profil par profil, entre résultats numériques et expérimentaux va s'avérer beaucoup moins satisfaisante

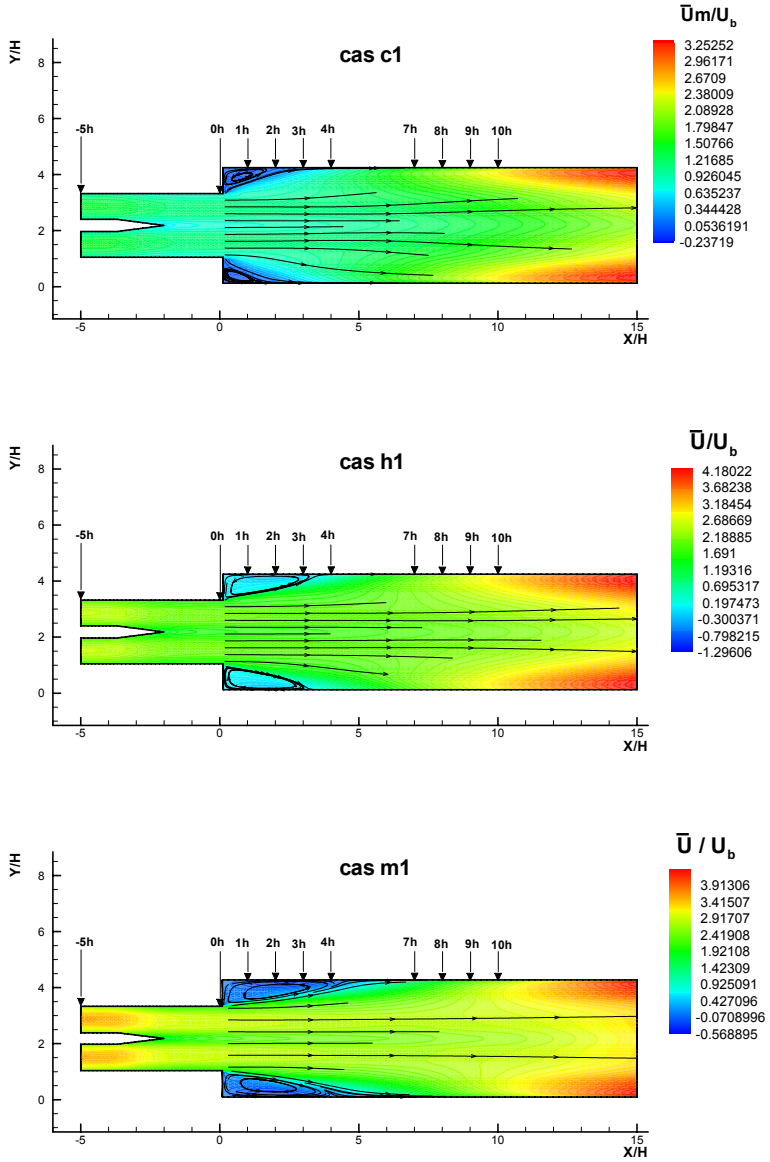

FIG. 7.6 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de la composante longitidinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

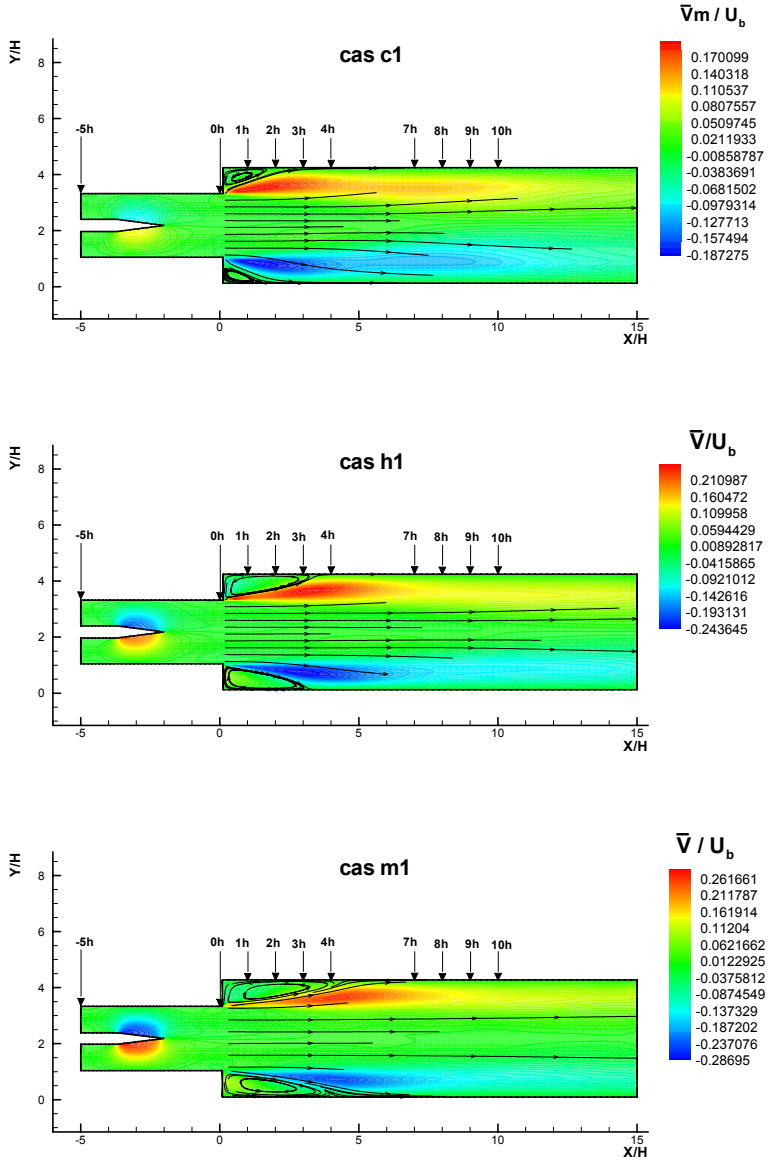

FIG. 7.7 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

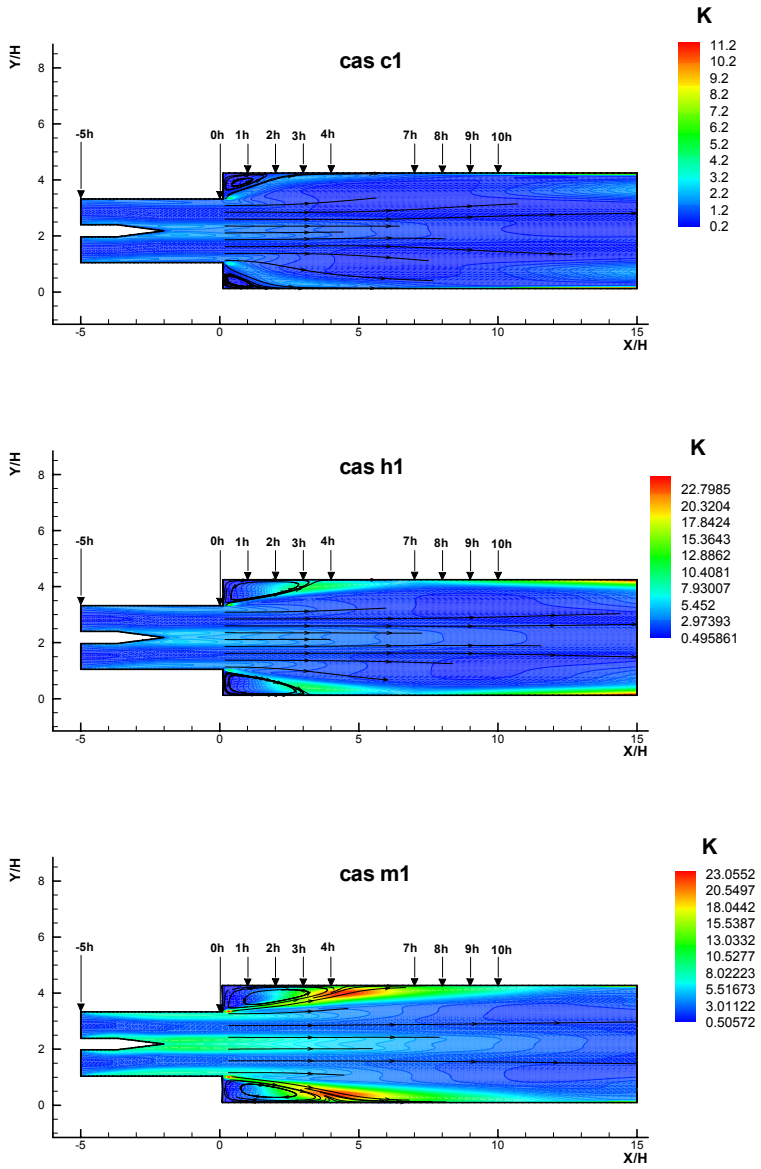

FIG. 7.8 – Simulation des écoulements réactifs c_1, h_1 et m_1 : champ de l'énergie cinétique de la turbulence (en m^2/s^2).

quant à la structure fine respective des écoulements moyens obtenus numériquement et expérimentalement notamment en ce qui concerne les fluctuations rms des deux composantes de la vitesse considérées.

7.2.2 Confrontation qualitative simulations-expérimentation

L'évolution, pour les trois écoulements, des profils de la composante longitudinale $\bar{U}$ dans le champ proche entre $x = -5h$ et $x = 3h$ est présentée sur la figure 7.9 alors que l'évolution dans le champ plus lointain de l'écoulement, soit de $x = 4h$ à $x = 10h$, est donnée sur la figure 7.10. Pour le champ proche, l'accord numérique-expérience est très correct avec une morphologie identique, à double bosse, pour tous les écoulements, chacune des bosses étant axée sur l'axe central des deux écoulements d'alimentation, soit en $y = 1,5h$ pour la bosse inférieure et $y = 2,8h$ pour la bosse supérieure. On note néanmoins que c'est au niveau de l'élargissement brusque que les différences de vitesse entre résultats numériques et résultats expérimentaux sont les plus importantes. En ce qui concerne le champ plus lointain de ces profils, l'accord simulations-expériences est là encore assez satisfaisant, et l'on observe que les simulations sont capables de reproduire correctement le changement de morphologie observé expérimentalement. En effet, on observe un "creusement" de la zone centrale des profils accompagné d'un décalage progressif vers les parois des "sommets" des deux bosses. Cette modification de la structure est associée bien sûr au développement de la combustion au niveau des couches de cisaillement qui induit une accélération progressive de l'écoulement dans cette zone qui conduit à la déformation observée des profils, puisque les maxima de vitesses ne vont plus se trouver au niveau des axes des canaux d'alimentation mais bien au niveau des couches de cisaillement, tout au moins dans la zone proche de développement des fronts moyens de réaction. On note également que ce changement de morphologie apparaît d'autant plus rapidement au sein de la veine d'essai que l'écoulement concerné est lent. Ainsi, ce changement s'amorce dès $x = 4h$ pour l'écoulement c_1 alors que pour l'écoulement le plus rapide m_1, on observe cette amorce de changement seulement vers $x = 10h$, alors que pour l'écoulement intermédiaire h_1, elle apparaît aux environs de $x = 7h$. En ce qui concerne l'évolution de la composante normale de cette même vitesse moyenne, nous ne disposons des données expérimentales que pour le cas c_1 mais nous avons néanmoins représenté les profils numériques obtenus pour les deux autres écoulements. Là également, les résultats numériques reproduisent très correctement la tendance d'évolution et la morphologie d'ensemble obtenues expérimentalement. On obtient en particulier un accord très satisfaisant au niveau de la zone centrale de l'écoulement dès $x = 2h$. Les simulations peinent en revanche à prévoir tout à fait correctement la localisation et le niveau des maxima de cette composante de la vitesse. Qu'en est'il maintenant au niveau des fluctuations de vitesse calculées à partir des expressions de type Boussinesq en utilisant les champs de vitesse moyenne, de k et de ε (non représentés) ? Nous allons voir que, pour ces grandeurs, l'accord simulations-expériences s'avère

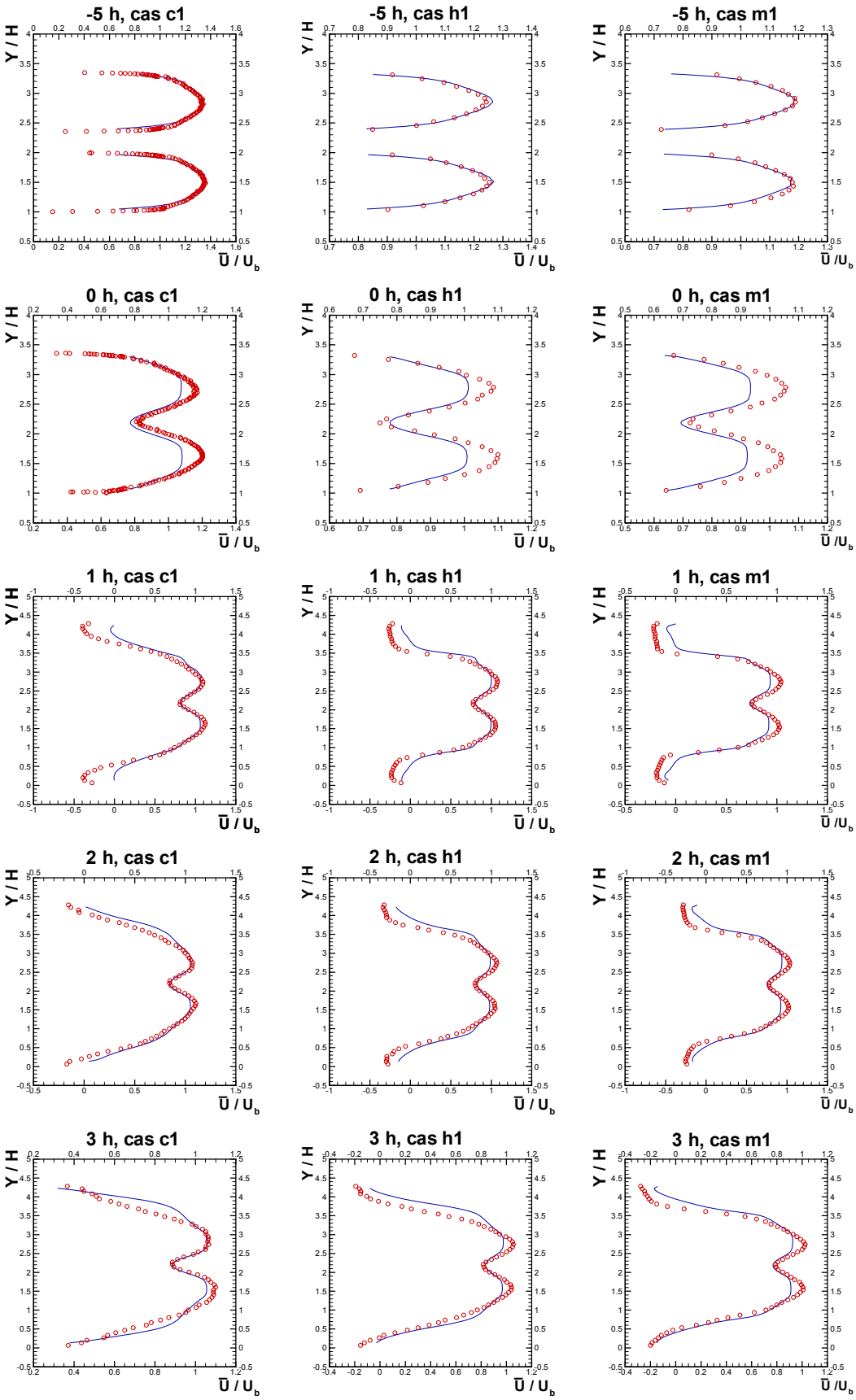

FIG. 7.9 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante longitudinale $\bar{U}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

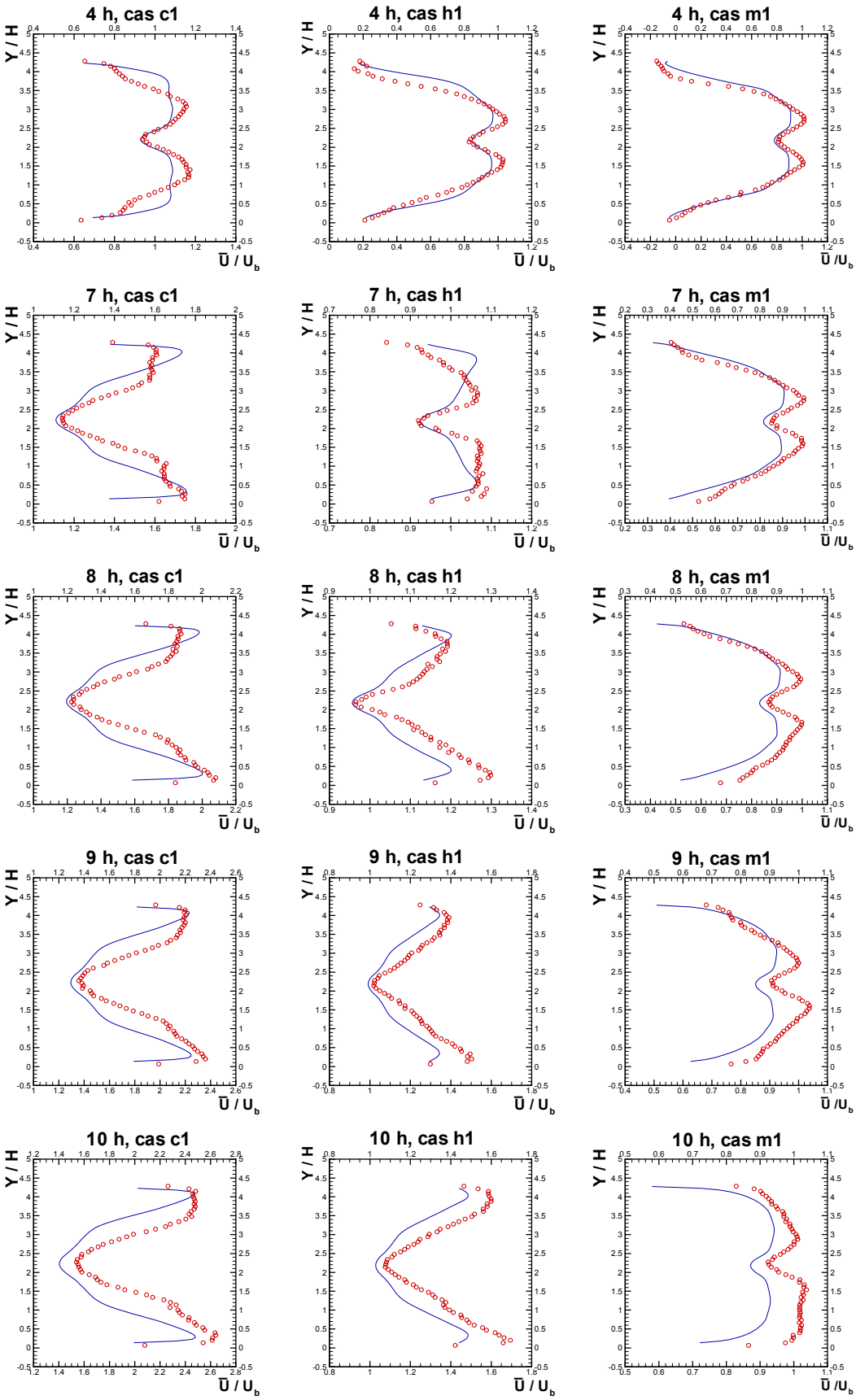

FIG. 7.10 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante longitudinale $\bar{U}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

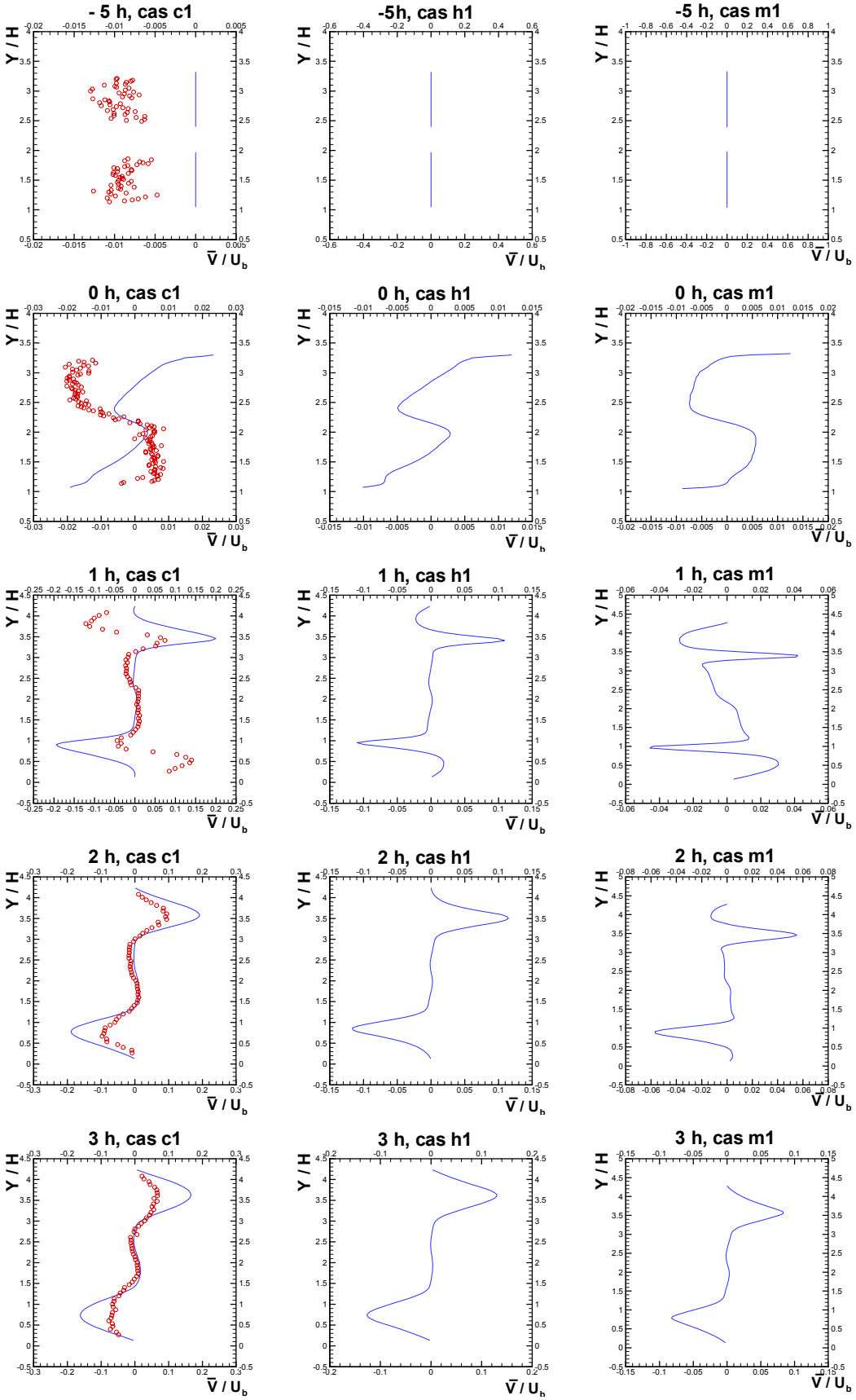

FIG. 7.11 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

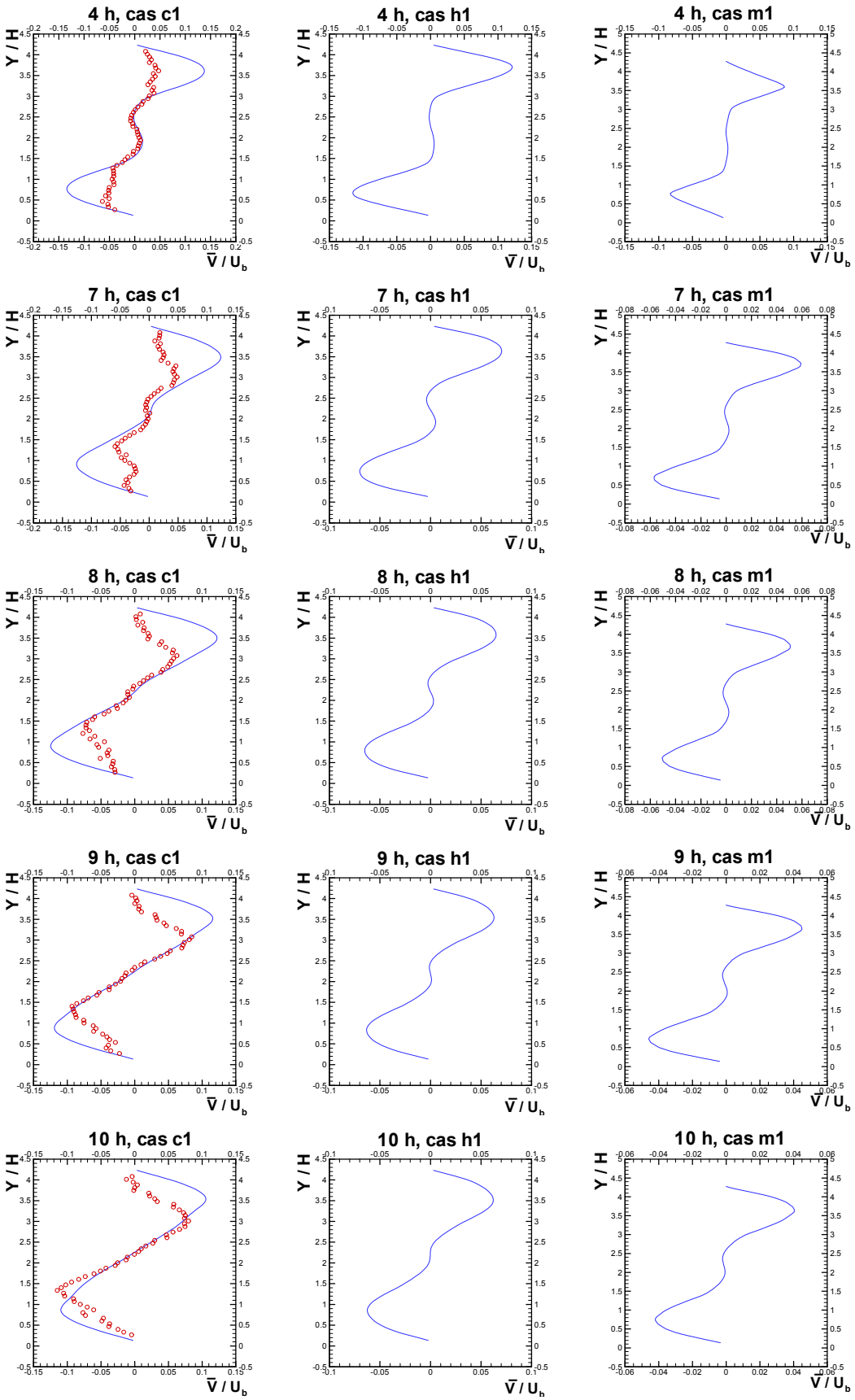

FIG. 7.12 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

être nettement moins bon que ce qui est observé pour les composantes moyennes, pour ne pas dire franchement mauvais. En effet, que l'on regarde l'évolution des profils de fluctuations de la composante longitudinale (figures 7.13 et 7.14), de la composante normale (figures 7.15 et 7.16) ou bien ceux de la contrainte de cisaillement moyenne (figures 7.17 et 7.18), il est bien difficile de trouver un motif de contentement. Pour aucun des trois écoulements considérés, il n'est possible d'identifier une abscisse pour laquelle on obtienne ne serait-ce qu'une morphologie identique, à défaut de profils qui se superposent. Et dans ce cas, il nous faut admettre que la modélisation employée ne fournit pas de résultats très satisfaisants. Certes, on pourra arguer du fait que l'on retrouve des ordres de grandeurs corrects, ou bien l'on pourrait s'arrêter, pour les écoulements h_1 et m_1, sur les profils numériques de fluctuations de la composante longitudinale en $x = 0h$ ou $x = 1h$ pour lesquels on observe une timide ressemblance avec ce qui est obtenu expérimentalement, mais ceci est bien peu de choses si l'on regarde les profils de la contrainte de cisaillement pour laquelle, hormis en $x = 0h$, l'allure de ceux-ci a peu de rapport avec ce qui est observé expérimentalement. Comment pouvons nous tenter d'expliquer cet important décalage observé au niveau des fluctuations de vitesse alors qu'en ce qui concerne les composantes moyennes, les comparaisons sont correctes ? Il nous semble qu'une des causes probables de ce décalage provient de la particularité des écoulements réactifs considérés en ce qui concerne leurs caractéristiques d'instationnarité. En effet, les écoulements que nous simulons se caractérisent, comme nous l'avons évoqué au chapitre 1, par un mouvement cohérent à grande échelle (à une fréquence de l'ordre par exemple de $50Hz$ pour l'écoulement c_1) qui contribue de manière très importante à l'énergie totale des fluctuations de vitesse. Pour mettre en évidence ce fait, Nguyen [54] et Nguyen et Bruel [56] [55] ont repris la décomposition triple d'une composante instantanée de la vitesse $u_i(t)$ initialement introduite par Hussain et Reynolds [40], soit :

$$u_i(t) = \bar{u}_i + u'_{i_p}(t) + u'_{i_s}(t) \tag{7.1}$$

où $\bar{u}_i$ désigne la grandeur moyenne indépendante du temps, $u'_{i_p}(t)$ est la fluctuation périodique qui est supposée être à une fréquence fixe et où $u'_{i_s}(t)$ correspond aux fluctuations stochastiques associées à la turbulence de l'écoulement. La somme $< u_i > (t) = \bar{u}_i + u'_{i_p}(t)$ représente ce que l'on appelle la moyenne de phase dont la résolution de l'équation d'évolution est l'objet du développement d'une approche de type semi-déterministe (ou RANS instationnaire) comme l'ont montré Ha Minh et Kourta [36] ou Louedin et Billet [52] par exemple. À partir du filtrage des spectres de $u_i(t)$, Nguyen et Bruel [56] ont alors pu estimer quelles étaient les contributions relatives du mouvement cohérent et de la turbulence au niveau de l'énergie cinétique des fluctuations totales. Ainsi, si nous considérons les fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse en $x = -5h$, le résultats du traitement des données expérimentales montrent que le mouvement cohérent pour l'écoulement c_1 contribue à plus de 80 % à l'énergie des fluctuations (soit quatre fois plus que le mouvement stochastique !) et à plus de 40 % pour l'écoulement h_1, et l'on retrouve ces mêmes niveaux de contribution au niveau de l'élargissement brusque

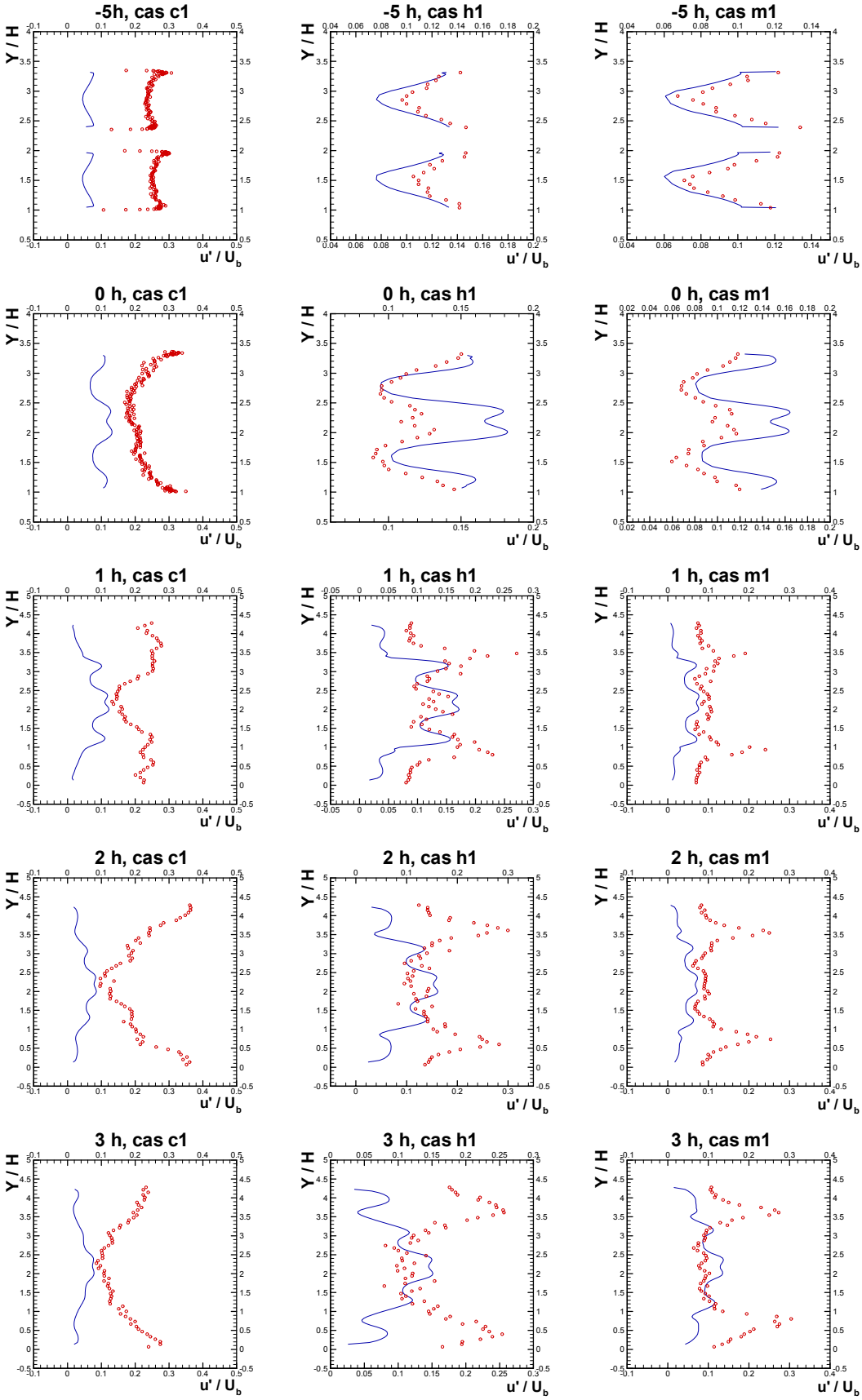

FIG. 7.13 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{u'}$ des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

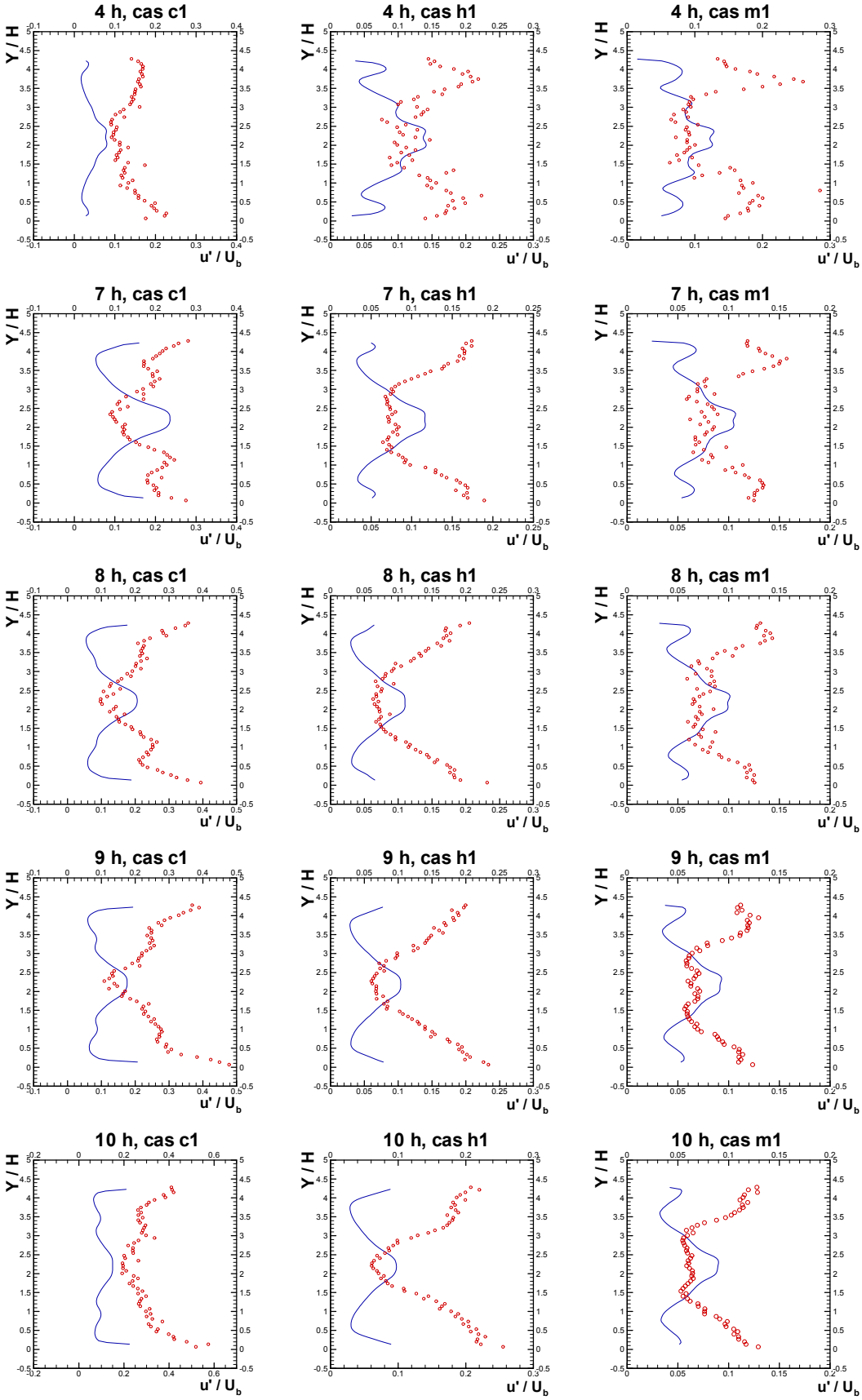

FIG. 7.14 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{u'}$ des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

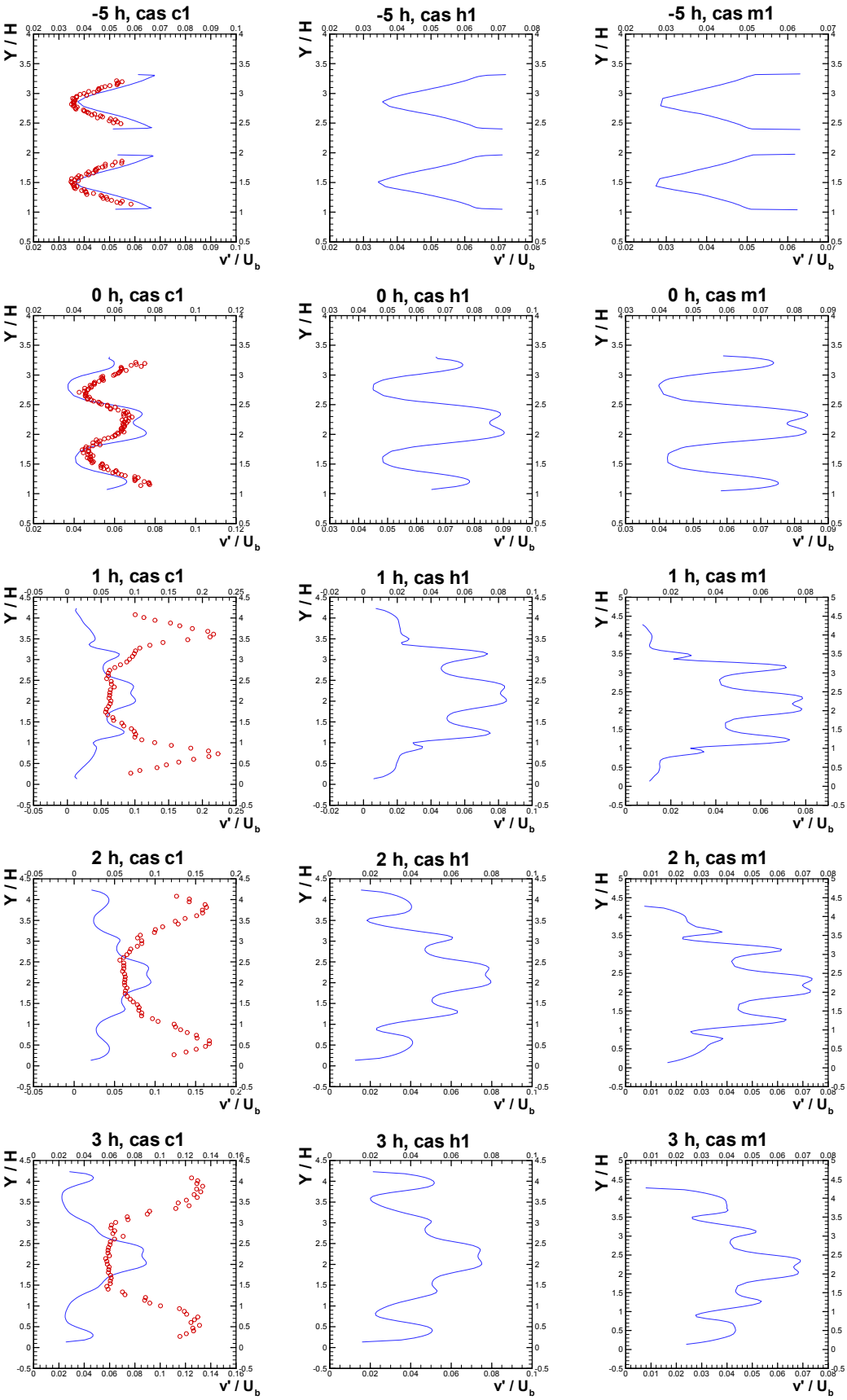

FIG. 7.15 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{v'}$ des fluctuations de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas c_1, $U_b = 11\ m/s$; Cas h_1, $U_b = 22\ m/s$; Cas m_1, $U_b = 33\ m/s$).

en $x = 0h$. Plus loin en aval, ces contributions du mouvement périodiques tendent à diminuer. C'est l'écoulement c_1 qui apparaît être celui qui est le plus enclin à cette prédominance du mouvement cohérent qui est associé à un phénomène de battement symétrique et intense des fronts de réaction. Les fluctuations de la composante normale de la vitesse sont elles aussi sujettes à cette importance des fluctuations périodiques, notamment au niveau des zones d'accrochage des fronts de réaction, c'est à dire au niveau de la périphérie des couches de cisaillement. En ce qui concerne les fluctuations stochastiques, il a également été montré que le niveau de celles-ci restait du même ordre de grandeur entre ce qui était observé pour les écoulements réactifs et leurs homologues inertes. Si l'on examine, à la lumière de ces remarques, les profils de fluctuations présentées par exemple sur la figure 7.13 et plus particulièrement celui en $x = -5h$, on observe que le rapport entre les résultats expérimentaux et les résultats de calcul est du même ordre de grandeur que celui qui existe expérimentalement entre la contribution du mouvement périodique et celle des fluctuations stochastiques à l'énergie totale des fluctuations. De plus, on observe que pour les écoulements pour lesquels la contribution du mouvement périodique n'est plus prédominante (par exemple l'écoulement h_1) on observe une certaine tendance des profils numériques à avoir une cohérence initiale avec les données expérimentales un peu meilleure en terme d'ordre de grandeur, si ce n'est de morphologie. Ainsi, il apparaît tout à fait plausible que les écarts importants observés proviennent en grande partie de l'incapacité intrinsèque de l'approche RANS retenue à permettre de capturer cette instabilité à grande échelle des écoulements réactifs simulés.

Constatant ce fait, nous aurions pu essayer "d'arranger" un peu les choses en injectant en entrée du domaine de calcul, les valeurs expérimentales des fluctuations totales de vitesse. Il nous a semblé que conceptuellement, il n'était pas cohérent de procéder ainsi puisque cela reviendrait en fait, à changer la nature même de l'origine des fluctuations en "reportant" intégralement et artificiellement, l'élévation importante de leur niveau sur la mouvement stochastique alors qu'il a été expérimentalement démontré que c'est le mouvement cohérent qui en est l'unique cause. Clairement, seule une approche véritablement instationnaire comme la LES ou peut-être le RANS instationnaire possède, *a priori*, la capacité à mieux appréhender la dualité de ce type d'écoulements, en ce qui relève de la coexistence d'un mouvement cohérent à grande échelle et de la turbulence. Ceci étant, les profils numériques des deux composantes de la vitesse moyenne étant quant à eux relativement satisfaisants, nous avons tout de même procédé à la recherche de leurs éventuelles propriétés de similitude, comme nous l'avions fait pour leurs homologues inertes. C'est ce que nous présentons au paragraphe suivant.

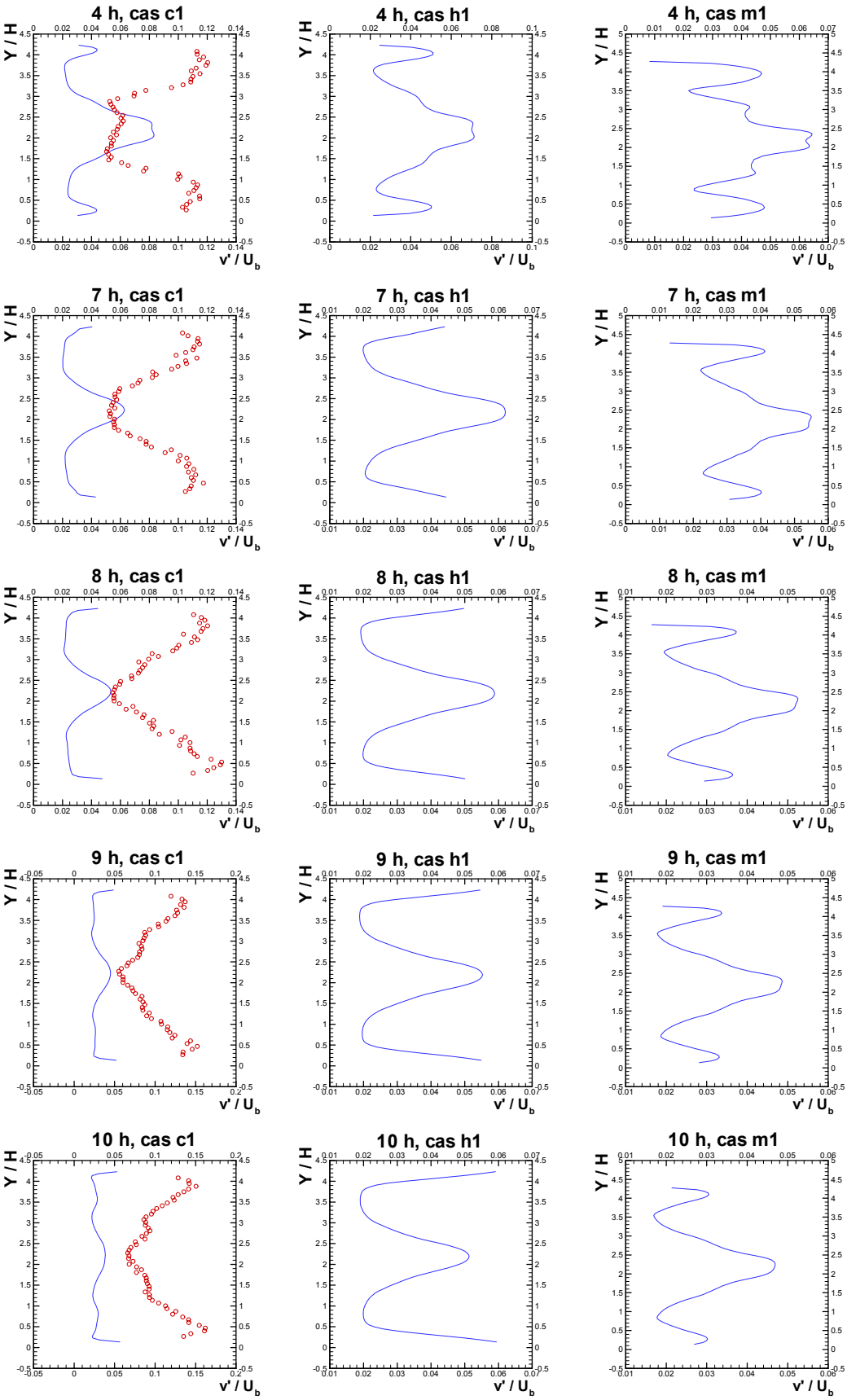

FIG. 7.16 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{v'}$ des fluctuations de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b (Cas $c_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $h_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $m_{1,}U_b = 33\ m/s$).

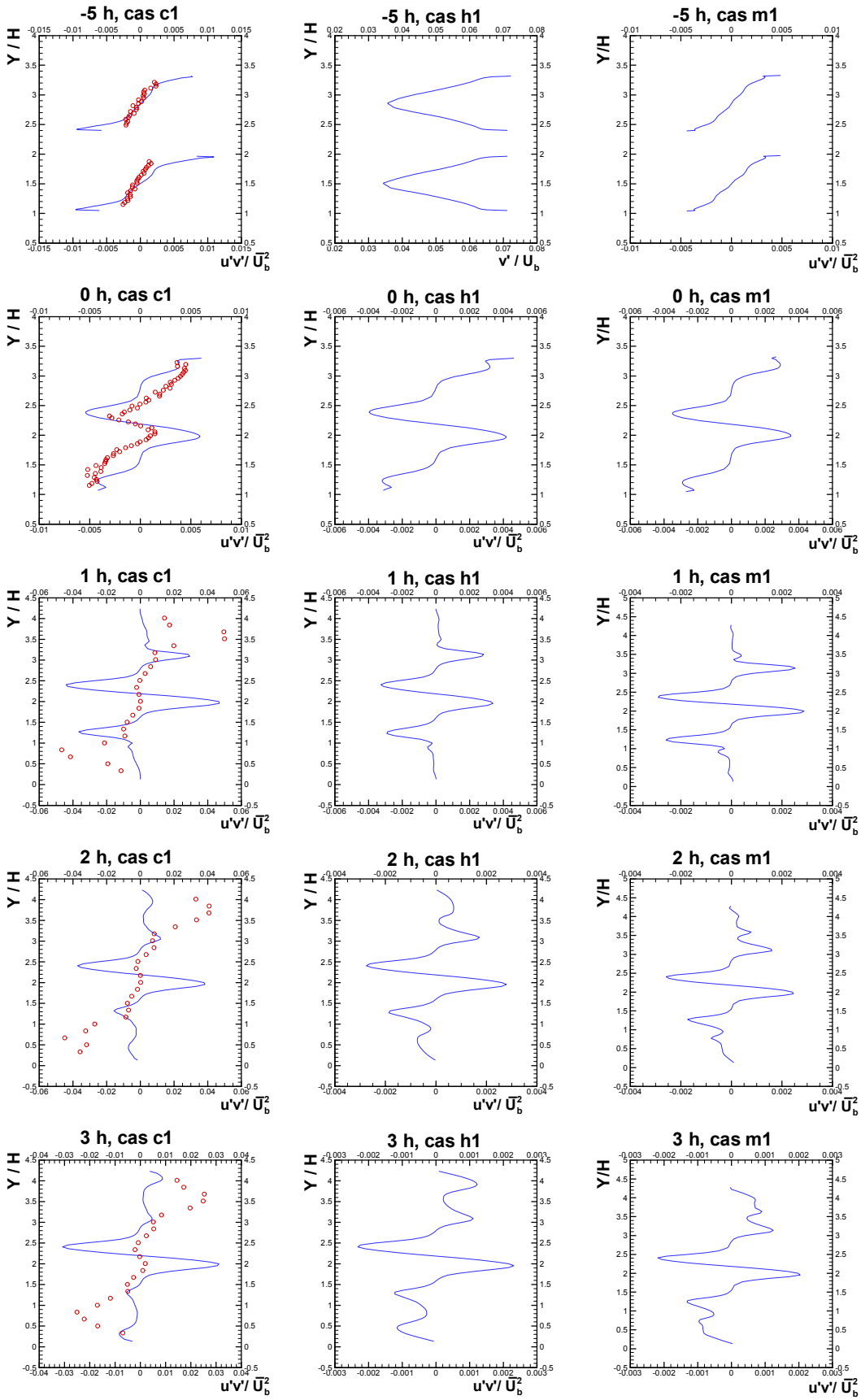

FIG. 7.17 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la contrainte moyenne de cisaillement $\overline{u'v'}$ normalisée par le carré de la vitesse débitante U_b (Cas $c_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $h_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $m_{1,}U_b = 33\ m/s$).

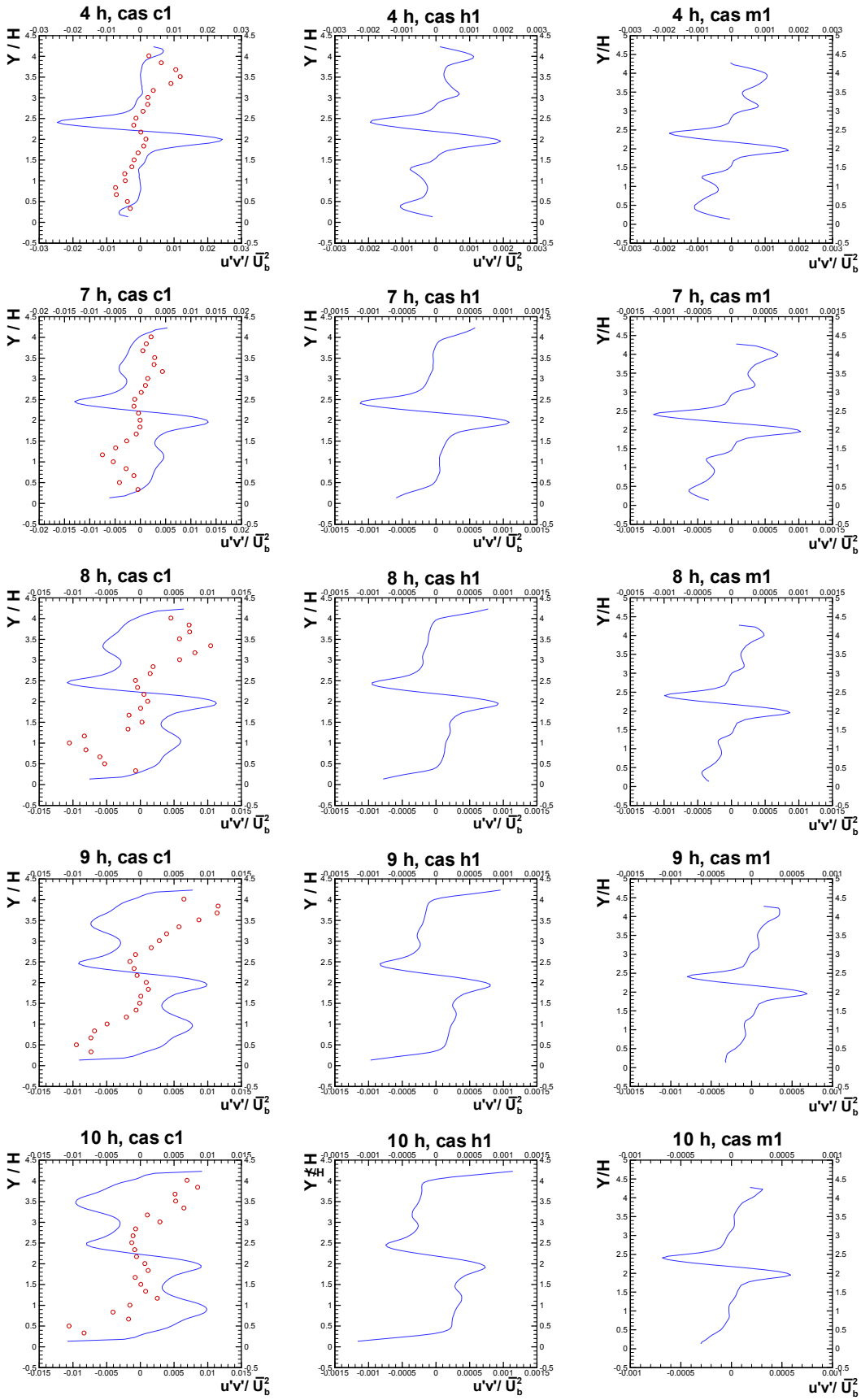

FIG. 7.18 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la contrainte moyenne de cisaillement $\overline{u'v'}$ normalisée par le carré de la vitesse débitante U_b (Cas $c_{1,}U_b = 11\ m/s$; Cas $h_{1,}U_b = 22\ m/s$; Cas $m_{1,}U_b = 33\ m/s$).

7.2.3 Étude des caractéristiques de similitude du sillage et des couches de cisaillement

Nous avons procédé en la matière d'une manière identique à ce que nous avons réalisé pour traiter les données des écoulements inertes.

Caractérisation du sillage

Les valeurs de l'épaisseur de quantité de mouvement à l'élargissement brusque Θ_0 que nous avons calculées sont regroupées dans le tableau 7.3 où les valeurs obtenues expérimentalement sont également rappelées. Il apparaît que, comme ce que nous avons obtenu pour les écoulements inertes, les valeurs numériques sont très proches des valeurs expérimentales. À partir de là, nous avons tracé l'évolution spatiale, en fonction de $\frac{x}{\Theta_0}$, des diverses échelles du sillage que sont l'épaisseur de quantité de mouvement réduite $\frac{\Theta}{\Theta_0}$, l'épaisseur de déplacement réduite $\frac{\delta^*}{\Theta_0}$ et l'épaisseur réduite de vitesse moitié $\frac{\delta_{1/2}}{\Theta_0}$. Pour chacun des trois écoulements étudiés, l'évolution de ces différentes quantités, obtenues à partir du traitement de nos résultats numériques est donnée sur la figure 7.19 ainsi que celle de la vitesse déficitaire $\frac{U_d}{u_{\max}}$. Nous avons également porté sur cette figure les évolutions obtenues par Nguyen [54] à partir de ses données expérimentales.

	Épaisseur Θ_0 de quantité de mouvement à l'élargissement brusque (mm)	
Cas	Expérimental (Nguyen [54])	Numérique
c_1	$3,80$	$3,66$
h_1	$3,66$	$3,52$
m_1	$3,67$	$3,57$

TAB. 7.3 – Épaisseur de quantité de mouvement au droit de l'élargissement brusque pour les écoulements réactifs à richesse constante considérés : comparaison entre les valeurs expérimentalement déterminées par Nguyen [54] et celles obtenues à partir de nos simulations.

Nous observons que pour les écoulements c_1 et h_1, on observe une cassure très nette dans l'évolution longitudinale des différentes échelles expérimentales du sillage, cette cassure intervenant aux environs de $\frac{x}{\Theta_0} = 55$ pour l'écoulement c_1 et pour environ $\frac{x}{\Theta_0} = 60$ pour l'écoulement h_1. Pour des valeurs de $\frac{x}{\Theta_0}$ inférieures à ces valeurs de transition observées expérimentalement, l'évolution spatiale des différentes échelles obtenues numériquement est assez proche de ce qui est observé expérimentalement, mais comme pour les écoulements inertes, la transition observée expérimentalement n'est pas du tout reproduite par les données numériques. La situation est différente pour ce qui est de l'écoulement le plus rapide m_1, pour lequel les évolutions spatiales

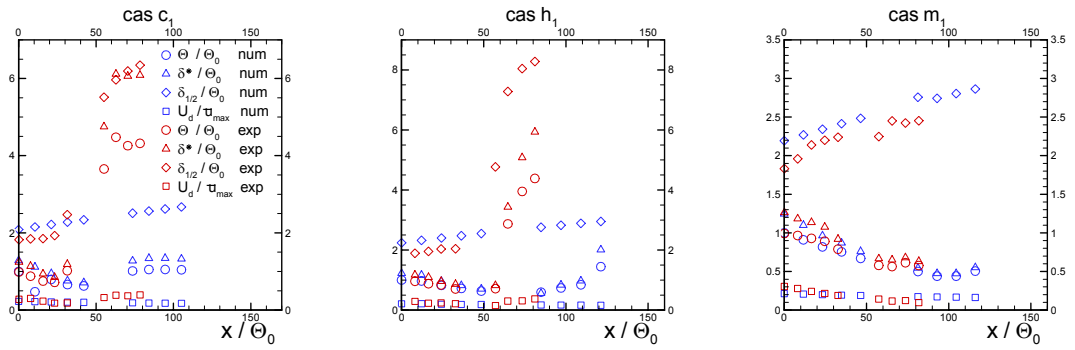

FIG. 7.19 – Sillages au sein des trois écoulements réactifs à richesse constante : évolution longitudinale des échelles réduites caractéristiques obtenues à partir du traitement de nos résultats numériques.

d'origine expérimentale et numérique sont similaires et sans aucune transition brutale sur l'ensemble du domaine spatial exploré. Après avoir interpolé linéairement les points de la courbe $\frac{\delta_{1/2}}{\Theta_0} = f(\frac{x}{\Theta_0})$, et l'avoir prolongée dans la limite $\frac{x}{\Theta_0} \rightarrow 0$ afin de déterminer l'abscisse de l'origine virtuelle du sillage pour chaque écoulement, nous avons pu alors tracer la distribution de la composante longitudinale de la vitesse moyenne en fonction des variables de similitude. Rappelons néanmoins ici, qu'en toute rigueur, ces variables ne sont pertinentes que pour des sillages à masse volumique constante. Les résultats obtenus pour nos écoulements réactifs sont présentés sur la figure 7.20 où la courbe théorique a été également tracée. On constate que les points se

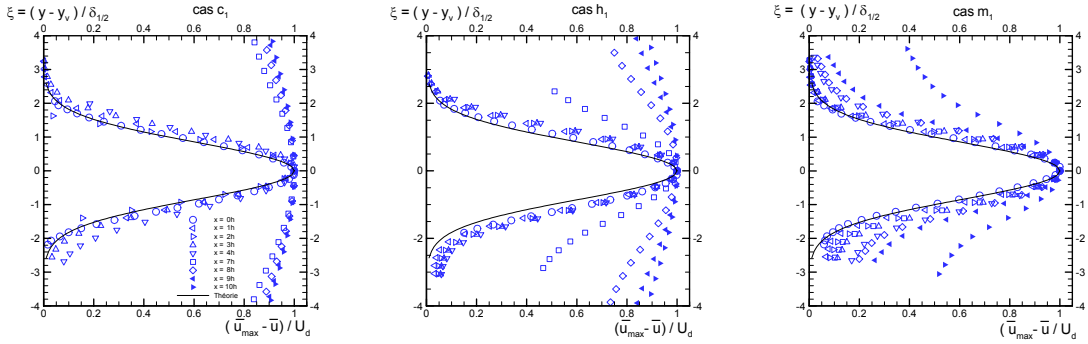

FIG. 7.20 – Sillages au sein des trois écoulements réactifs à richesse constante simulés : profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude après traitement des résultats numériques.

regroupent d'autant mieux autour du profil théorique que l'écoulement est plus rapide, et en fait, la zone de développement initial du sillage présente un comportement self-similaire plus marqué que ce que nous avions observé pour les écoulements inertes correspondants. On a ici l'impression que le sillage central se trouve en quelque sorte comprimé par le développement des

deux zones de réaction moyennes qui se situent au niveau des couches de cisaillement et que cette compression renforce en quelque sorte la self-similarité de cette zone, du moins tant que la masse volumique est constante.

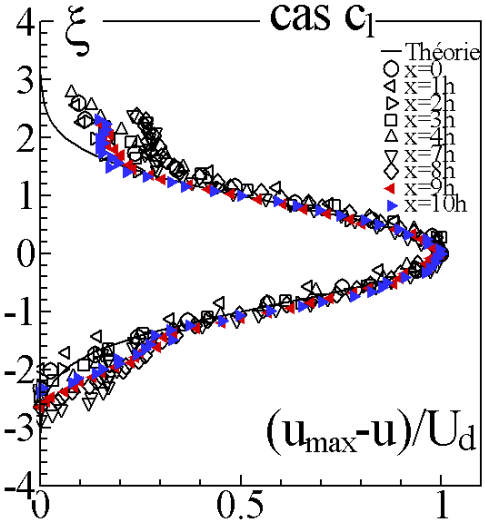

FIG. 7.21 – Sillage au sein de l'écoulement c_1 : exemple de profils expérimentaux de la composante longitudinale de la vitesse longitudinale tracés en variable de similitude (D'après Nguyen [54]).

Étant donné que c'est pour l'écoulement le plus lent c_1 que ces deux zones de réaction se rejoignent le plus rapidement et conduisent donc à l'évolution spatiale de la masse volumique, il apparaît alors normal que ce soit pour cet écoulement que nous observions le plus précocement, dès $x = 7h$, "l'ouverture" du profil de vitesse, indiquant par là-même la fin de la validité des hypothèses de base présidant à l'établissement de la solution théorique. Si l'on se reporte aux courbes expérimentales équivalentes obtenues pour ce même écoulement et présentées sur la figure 7.21, on observe qu'en réalité, la propriété de self-similarité est "conservée" par le sillage expérimental plus longtemps que ce qui est obtenu numériquement mettant ainsi en évidence une différence de comportement dans la zone plus en aval au sein de la veine d'essai.

Caractérisation des couches de cisaillement supérieures et inférieures

L'évolution spatiale de l'épaisseur de vorticité obtenue à partir de nos résultats est présentée sur la figure 7.22. L'évolution la plus proche de celle qui a été observée expérimentalement est obtenue pour l'écoulement le plus rapide m_1. En revanche, pour l'écoulement c_1, les résultats de la comparaison ne sont pas très bons et l'on a même du mal à discerner une évolution linéaire de l'épaisseur de vorticité. L'évolution des différentes échelles présentées sur la figure 7.23 met également en lumière la disparité assez forte qui existent entre les échelles issues de nos simulations et celle issues des mesures. Cette disparité va se retrouver naturellement au niveau des

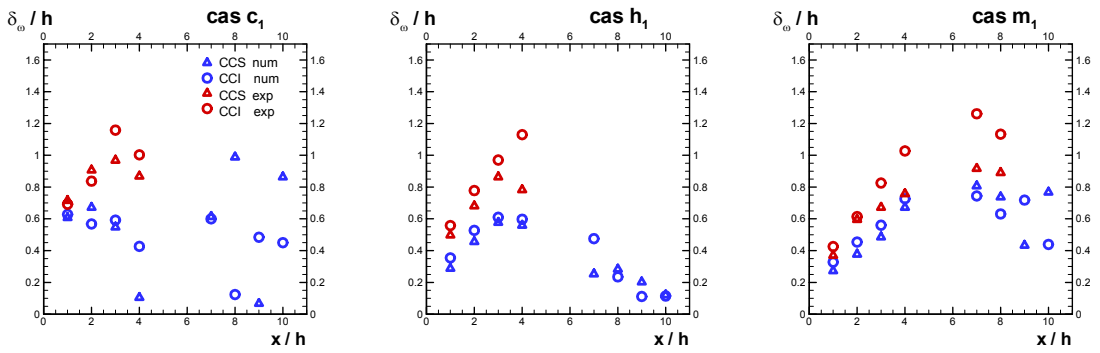

FIG. 7.22 – Couches de cisaillement au sein des trois écoulements réactifs à richesse constante étudiés : évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité obtenue à partir du traitement de nos résultats numériques.

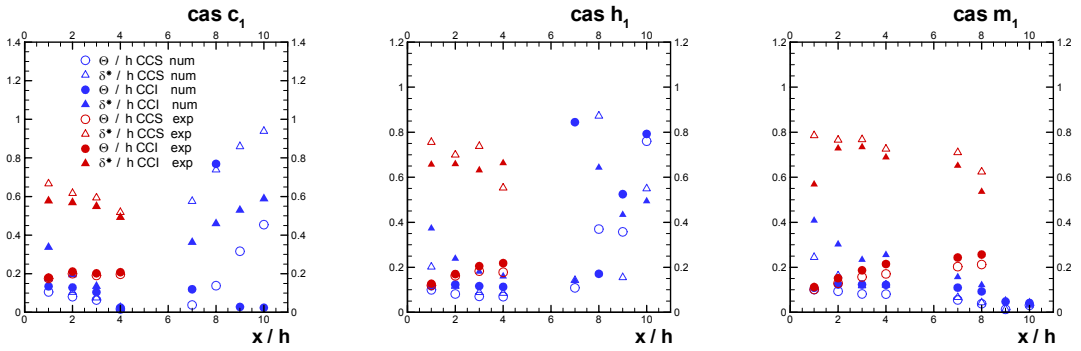

FIG. 7.23 – Propriétés des couches de cisaillement des trois écoulements réactifs à richesse constante simulés : évolution longitudinale de l'épaisseur de vorticité obtenue numériquement à partir de nos calculs (symboles bleus) et à partir de ses données expérimentales par Nguyen [54] (symboles rouges).

caractéristiques d'épanouissement des couches comme l'attestent les valeurs regroupées au sein du tableau 7.4. On passe carrément du simple au double en ce qui concerne le taux d'épanouissement et en ce qui concerne le rapport δ_ω/Θ, on note que l'écoulement c_1 se distingue par des valeur particulièrement élevées qui n'ont plus grand chose à voir avec les valeurs expérimentales.

Cas	Couche de cisaillement	x_v/h		σ		δ_ω/Θ	
		Num.	Expé.	Num.	Expé.	Numé.	Expé.
c_1	Supérieure	$-7,52$	$-4,56$	$25,32$	$13,63$	$17,83$	$4,41$
	Inférieure	$-3,53$	$-1,80$	$19,26$	$7,70$	$10,2$	$4,52$
h_1	Supérieure	$-3,02$	$-1,76$	$18,855$	$9,84$	$6,76$	$4,38$
	Inférieure	$-2,52$	$-2,04$	$15,42$	$9,33$	$4,94$	$4,71$
m_1	Supérieure	$-3,4$	$-2,36$	$20,18$	$14,77$	$5,06$	$4,25$
	Inférieure	$-3,7$	$-1,13$	20	$8,86$	$4,16$	$4,48$

TAB. 7.4 – Couches de cisaillement pour les écoulements à richesse constante considérés : valeurs expérimentales (D'après Nguyen [54]) et numériques de l'abscisse x_v de l'orgine virtuelle, du taux d'épanouissement σ et du rapport moyen entre l'épaisseur de vorticité et l'épaisseur de quantité de mouvement.

Le tracé des profils de vitesse en fonction des variables de similitude pertientes est présenté sur la figure 7.24. On observe que pour l'écoulement le plus lent c_1, il n'existe de regroupement self-similaire que dans la zone de développement initial des couches, typiquement jusqu'à $x = 2\ h$, alors que ce regroupement est observé jusqu'à $x = 4\ h$ en ce qui concerne les deux autres écoulements. Si l'on compare avec les résultats expérimentaux, illustrés pour l'écoulement c_1 par la figure 7.25, on observe en fait pour les trois écoulements considérés, un comportement "d'écart" progressif à la solution self-similaire des profils numériques assez proche de ce qui est est observé expérimentalement.

7.3 Influence de la présence d'une différence de richesse incidente : écoulements c_2 et c_3

7.3.1 Propriétés d'ensemble des champs moyens

Les écoulements c_2 et c_3 se caractérisent par une différence de richesse incidente entre les deux écoulements d'alimentation. En conséquence, il va donc se former une couche de mélange scalaire de fraction massique moyenne de propane qui va se développer au sein de la zone centrale du sillage dynamique. On observe parfaitement cette couche de mélange scalaire sur la figure 7.26 qui présente le champ de fraction massique moyenne de propane. On observe le comportement attendue pour cette couche scalaire, à savoir son épaississement progressif au niveau de

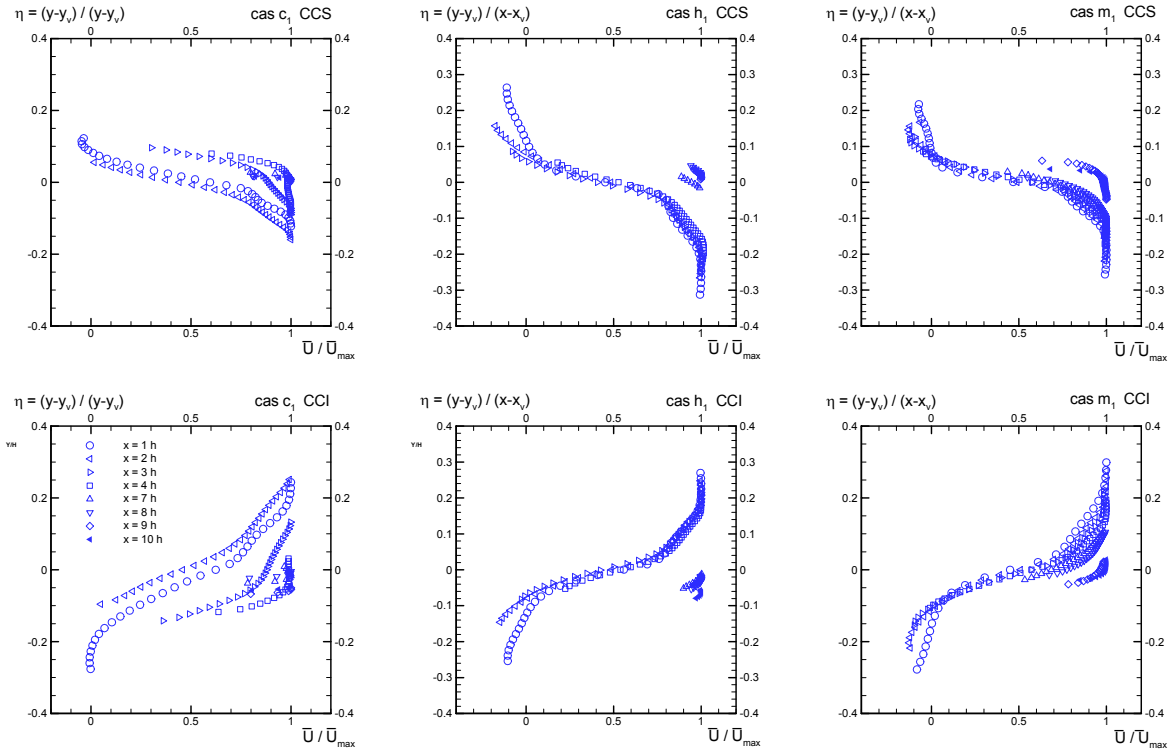

FIG. 7.24 – Couches de cisaillement au sein des trois écoulements réactifs à richesse constante simulés : profils de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude.

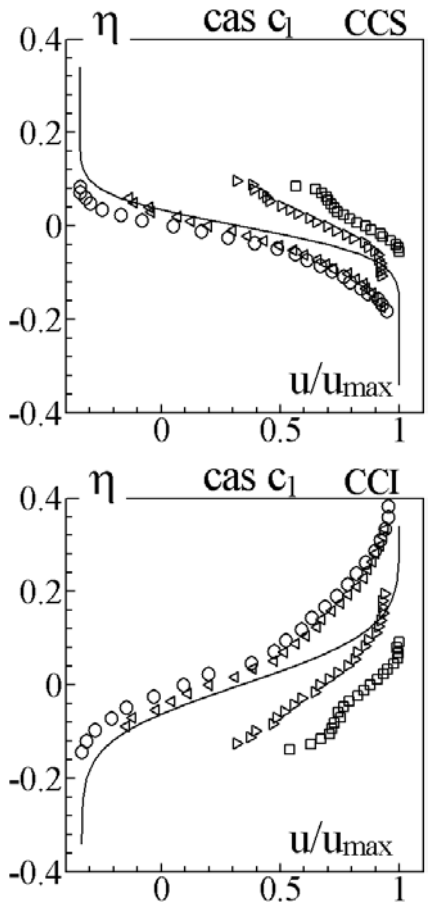

FIG. 7.25 – Couches de cisaillement au sein de l'écoulement c_1 : exemple de profils expérimentaux de la composante longitudinale de la vitesse moyenne tracés en fonction des variables de similitude (D'après Nguyen [54]).

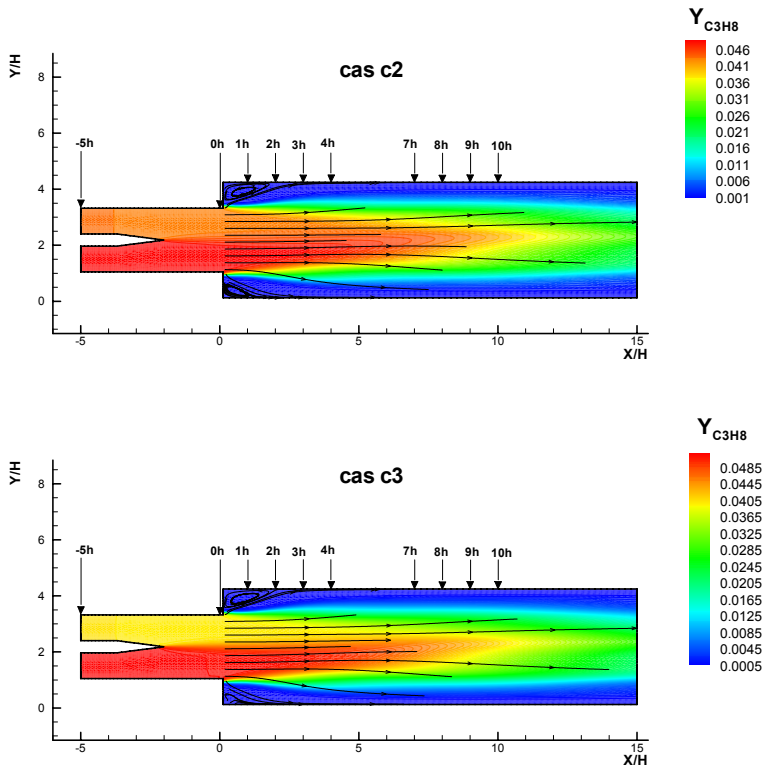

FIG. 7.26 – Simulation des écoulements réactifs c_2, c_3 : champ de la fraction massqiue moyenne de propane).

l'axe central de la veine d'essai. Si l'on s'intéresse maintenant à la manière dont les deux zones de réaction moyennes sont "accrochées" à partir de l'examen du champ du terme de production chimique moyen présenté sur la figure 7.27, on remarque que les deux zones d'accrochage, se situent toujours au niveau de la naissance des deux couches de cisaillement avec l'obtention des maxima du terme de production au voisinage de ces deux zones. Compte-tenu des caractéris-

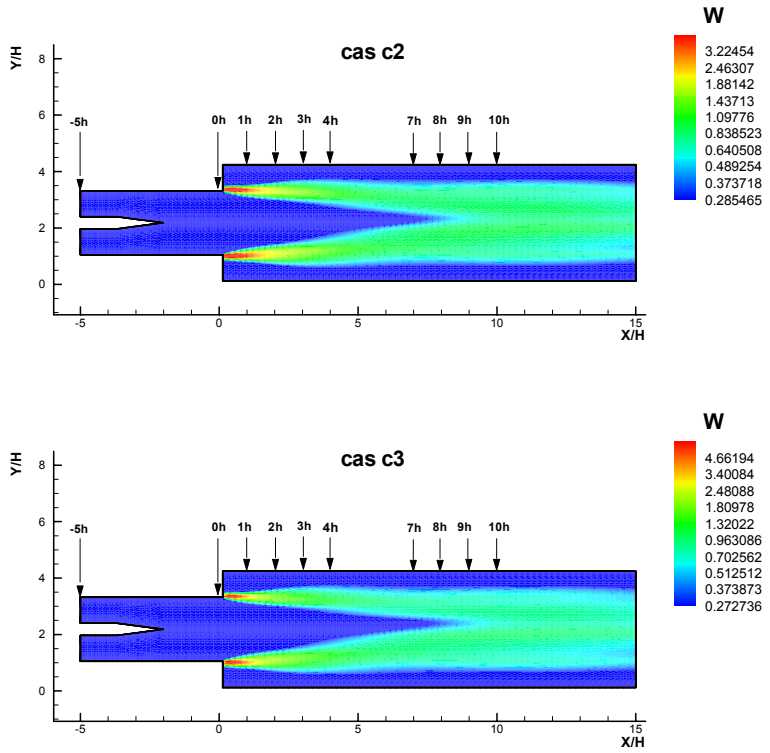

FIG. 7.27 – Simulation des écoulements réactifs c_2, c_3 : champ du terme de production chimique moyen (en $kg/m^3/s$).

tiques du champ de fraction massique moyenne de combustible dans ces zones d'accrochage, il est clair que la zone de gradient de richesse qui s'épaissit progressivement ne va pouvoir modifier les zones de réaction qu'une fois que ces dernières et la couche scalaire viendront "au contact". C'est en fait le champ de la variance de la fraction de mélange qui nous renseigne pour savoir si la combustion se déroule dans une zone à richesse constante ou à richesse variable. La figure 7.28 permet ainsi de distinguer instantanément les zones de l'écoulement où la combustion se déroule à richesse constante de celles où elle se déroule en régime partiellement prémélangée à richesse variable. Comme l'on pouvait s'y attendre, la couche de mélange scalaire est initialement très mince (à cause de la terminaison en lame de la plaque séparatrice) avec un niveau important de la variance qui correspond à une quasi-bimodalité de la PDF de Z_f. Au niveau de l'élargissement brusque, l'épaisseur de la couche est d'environ $0,3h$ et elle atteint un peu plus de $2h$ en sortie

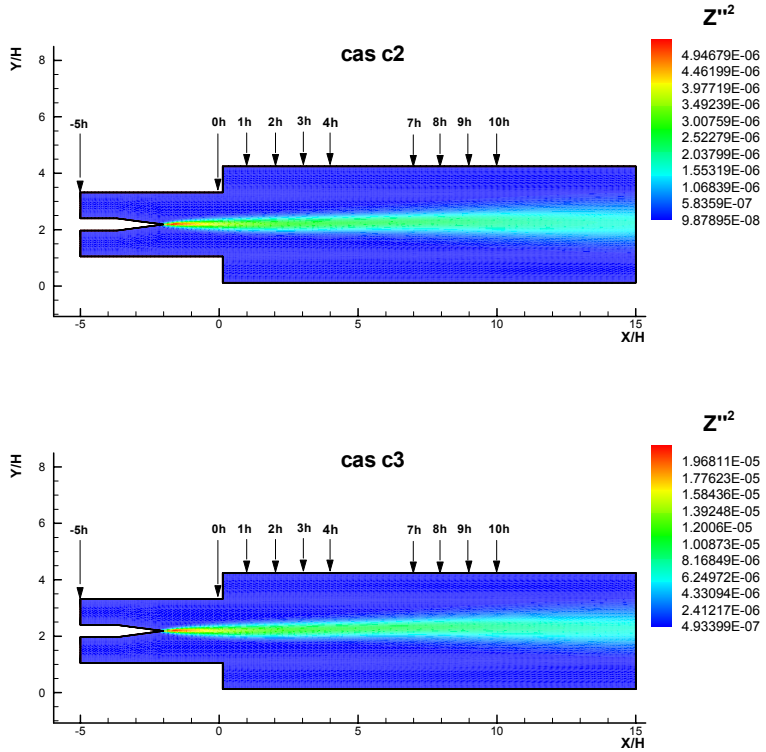

FIG. 7.28 – Simulation des écoulements réactifs c_2, c_3 : champ de la variance de la fraction de mélange.

du domaine de calcul, soit pour $x = 15h$. On observe ainsi clairement que les zones d'accrochage se situent dans un domaine où la combustion se déroule à une richesse constante et qu'en ce qui concerne la stabilisation des zones de réaction moyennes, les propriétés énoncées précédemment au chapitre 3 s'appliquent bien, justifiant par là-même la procédure que nous avons utilisée pour stabiliser nos calculs à partir de la variation de la valeur du paramètre C_{CLE}. Ainsi, ce n'est que dans la zone centrale de la veine d'essai et assez loin en aval, typiquement à partir de $x \approx 6h$ que l'on est effectivement en présence d'une zone de combustion qui se développe localement au sein d'un écoulement à richesse variable. Il est dommage que l'on ne dispose pas de données expérimentales en la matière qui nous auraient permis de vérifier si le taux de croissance de la couche de mélange scalaire est prévu correctement par nos simulations. Le champ de la température moyenne apparaît quant à lui cohérent avec le fait que c'est l'écoulement d'alimentation inférieur qui est le plus riche, puisque c'est précisément de ce côté que l'on observe les niveaux de température les plus élevés. On a un peu le sentiment que, la présence de la couche de mé-

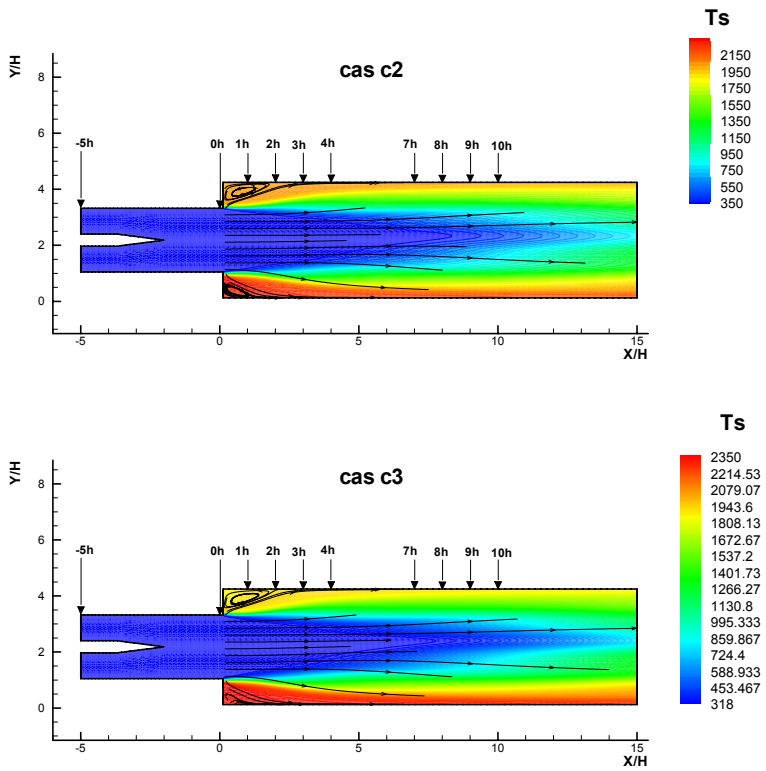

FIG. 7.29 – Simulation des écoulements réactifs c_2, c_3 : champ de la température moyenne (en Kelvin).

lange scalaire centrale mise à part, la zone moyenne proche de l'écoulement est qualitativement très comparable à celle observée pour l'écoulement à richesse constante c_1, et qu'elle peut dans tous les cas être considéré comme formée de deux fronts moyens indépendants l'un de l'autre.

Expérimentalement, ces deux fronts moyens de caractéristiques initiales différentes en ce qui concerne les écoulements c_2 et c_3, délimitent des zones de recirculation moyennes dont l'extension longitudinale est liée à la richesse de l'écoulement qui alimente le front qui la délimite en partie. Plus celle-ci est élevée, et plus la zone de recirculation délimitée est courte. C'est effectivement ce que l'on peut observer à partir de l'examen (attentif!) du champ de la composante longitudinale de la vitesse moyenne présentée sur la figure 7.30 et sur le tableau 7.5 qui regroupe

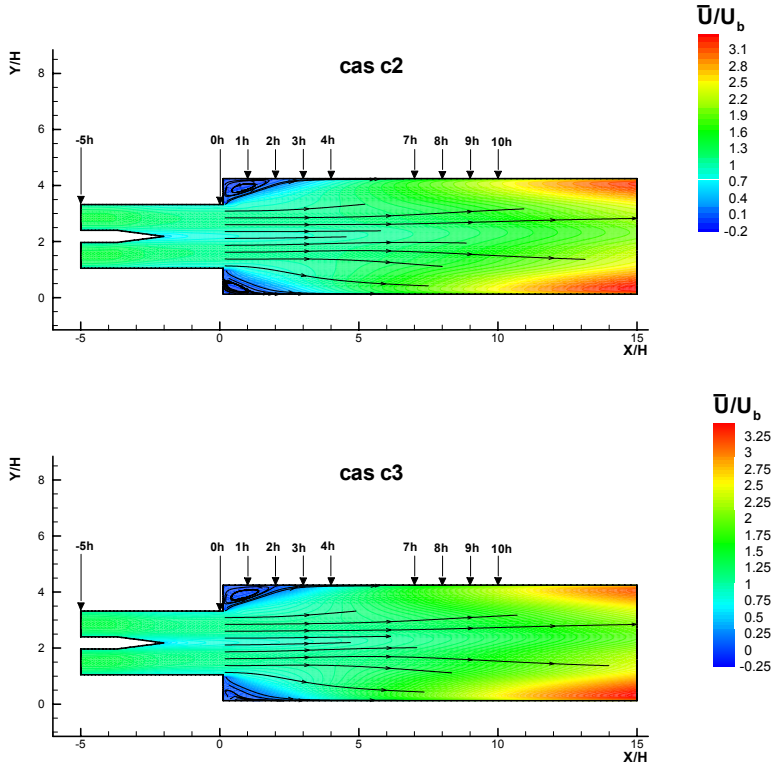

FIG. 7.30 – Simulation des écoulements réactifs c_2, c_3 : champ de la composante longitidinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

les valeurs des longueurs de recirculation moyenne obtenues. On observe bien que du côté de l'écoulement le plus riche (canal d'alimentation inférieur), la zone de recirculation moyenne est effectivement plus courte que celle du niveau supérieur, de manière particulièrement nette en ce qui concerne l'écoulement c_3, puiqu'en revanche pour l'écoulement c_2, nous n'observons pas de différence notable avec les résultats obtenus pour l'écoulement c_1. On observe également que ce raccourcissement apparaît être bien trop prononcé lorsqu'on le compare à ce qui est observé expérimentalement. En bref, nos simulations restituent bien la tendance observée expérimentalement mais incorrectement son amplitude. Voyons maintenant comment cela se traduit au niveau d'une comparaison profil par profil.

	Longueur des zones de recirculation			
	Inférieure		**S**upérieure	
Cas	expérimental	numérique	expérimental	numérique
c_2	$2,3h$	$1,6h$	$2,5h$	$2h$
c_3	$1,9h$	$0,5h$	$2,8h$	$2h$

TAB. 7.5 – Longueur des zones de recirculation des écoulements réactifs simulés et présentant une différence de richesse incidente .

7.3.2 Confrontation qualitative simulations-expérimentation

En ce qui concerne les composantes de la vitesse moyenne, les profils permettant la comparaison avec les données expérimentales sont présentés sur la figure 7.31 en ce qui concerne la composante longitudinale et la figure 7.32 pour ce qui relève de la composante normale. Les morphologies sont très correctement reproduites dans l'ensemble, et les écarts observés sont cohérents avec la différence obtenue en ce qui concerne les longueurs des zones de recirculation moyennes. C'est peut-être en ce qui concerne la composante normale, que la comparaison entre les résultats numériques et les résultats expérimentaux est peut-être la plus emblématique. Prenons en effet les profils obtenus pour le cas c_2 en $x = 8\ h$. On observe que du côté de l'écoulement le plus pauvre, le maximum de vitesse obtenu numériquement correspond à un minimum pour l'expérience ! Mais on voit également qu'une "simple" opération de décalage et compression du profil numérique permettrait de se rapprocher de l'expérience. Ainsi, nous nous situons ici sur la même échelle de "qualité" que ce que nous avions observé en ce qui concerne l'écoulement c_1, une structure d'ensemble du champ des vitesses moyennes assez correcte mais des décalages de structure suffisamment importants pour induire localement des différences significatives.

En ce qui concerne les tensions de Reynolds, le constat est identique à celui qui a été dressé pour l'écoulement c_1 avec des décalages très importants, comme par exemple pour la fluctuation rms de la composante longitudinale en $x = -5\ h$. Comme pour l'écoulement c_1, Nguyen [54] indique que les écoulements c_2 et c_3 sont également le siège d'un mouvement cohérent à grande échelle qui peut expliquer, en partie du moins, les écarts observés entre les amplitudes des fluctuation calculées et mesurées.

7.4 Écart quantitatif entre résultats de simulation et résultats expérimentaux

Finalement, l'ensemble de tous nos calculs des écoulements réactifs considérés peut se résumer aux chiffres présentés dans le tableau 7.6. On y retrouve clairement les tendances que

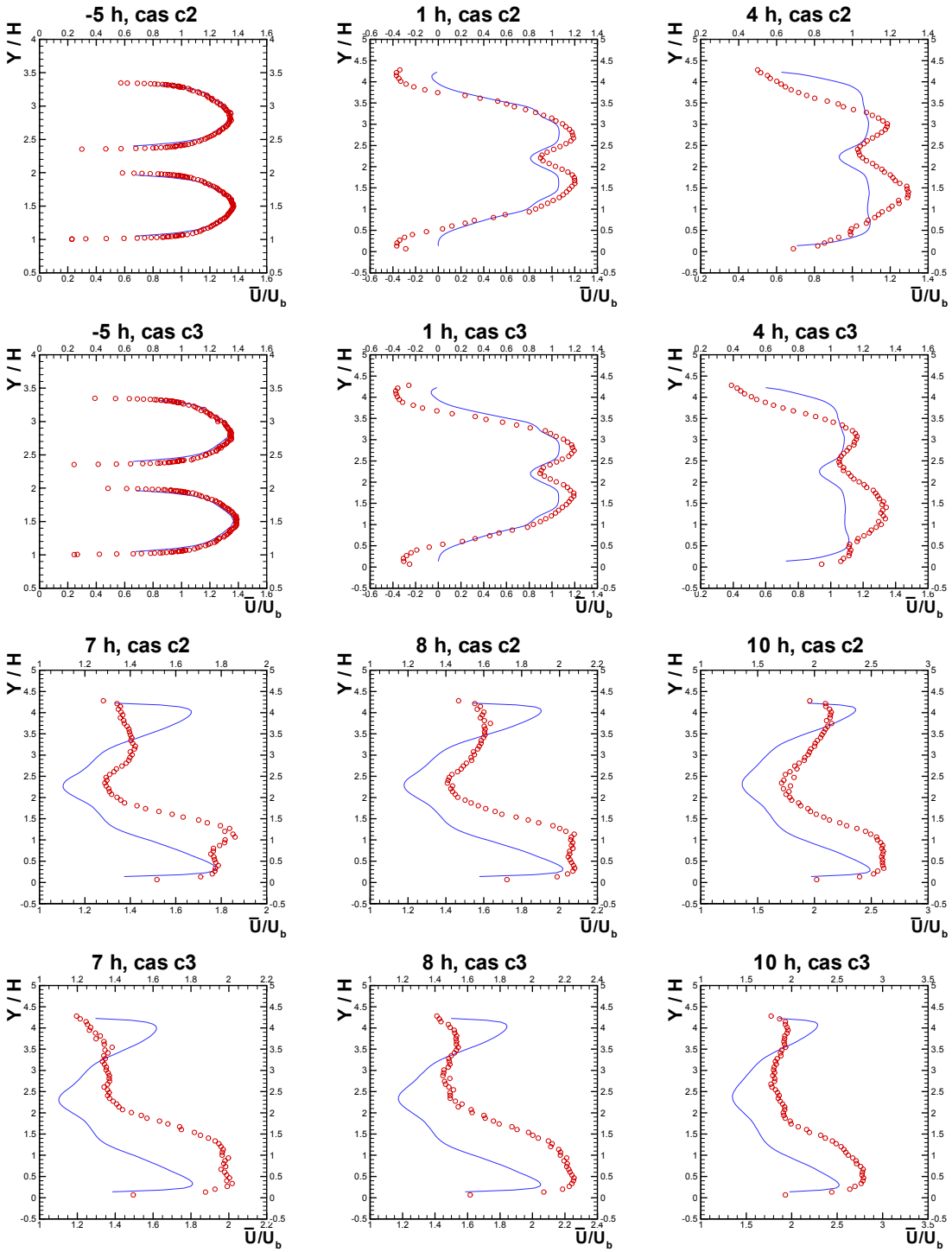

FIG. 7.31 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante longitudinale $\bar{U}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

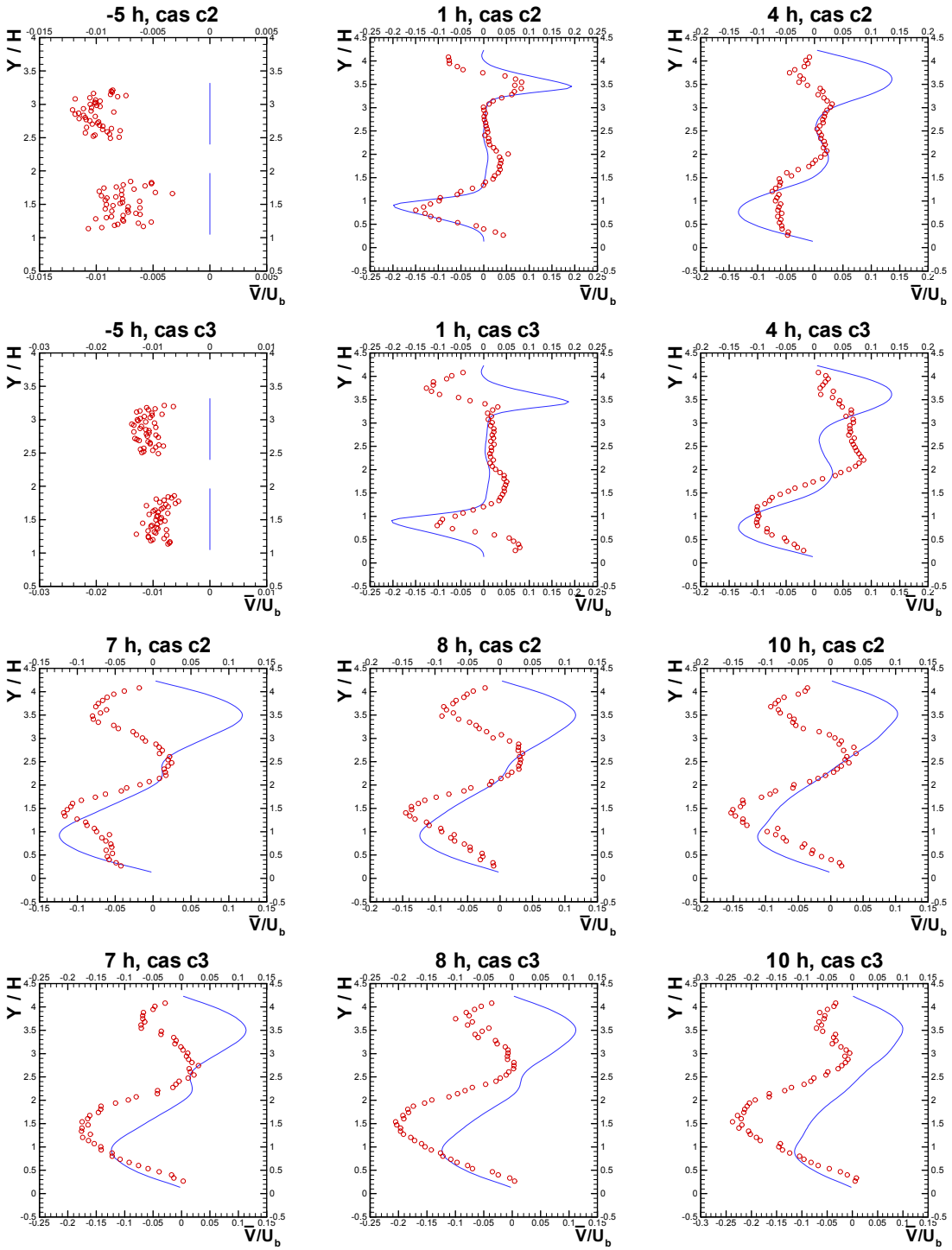

FIG. 7.32 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la composante normale $\bar{V}$ de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

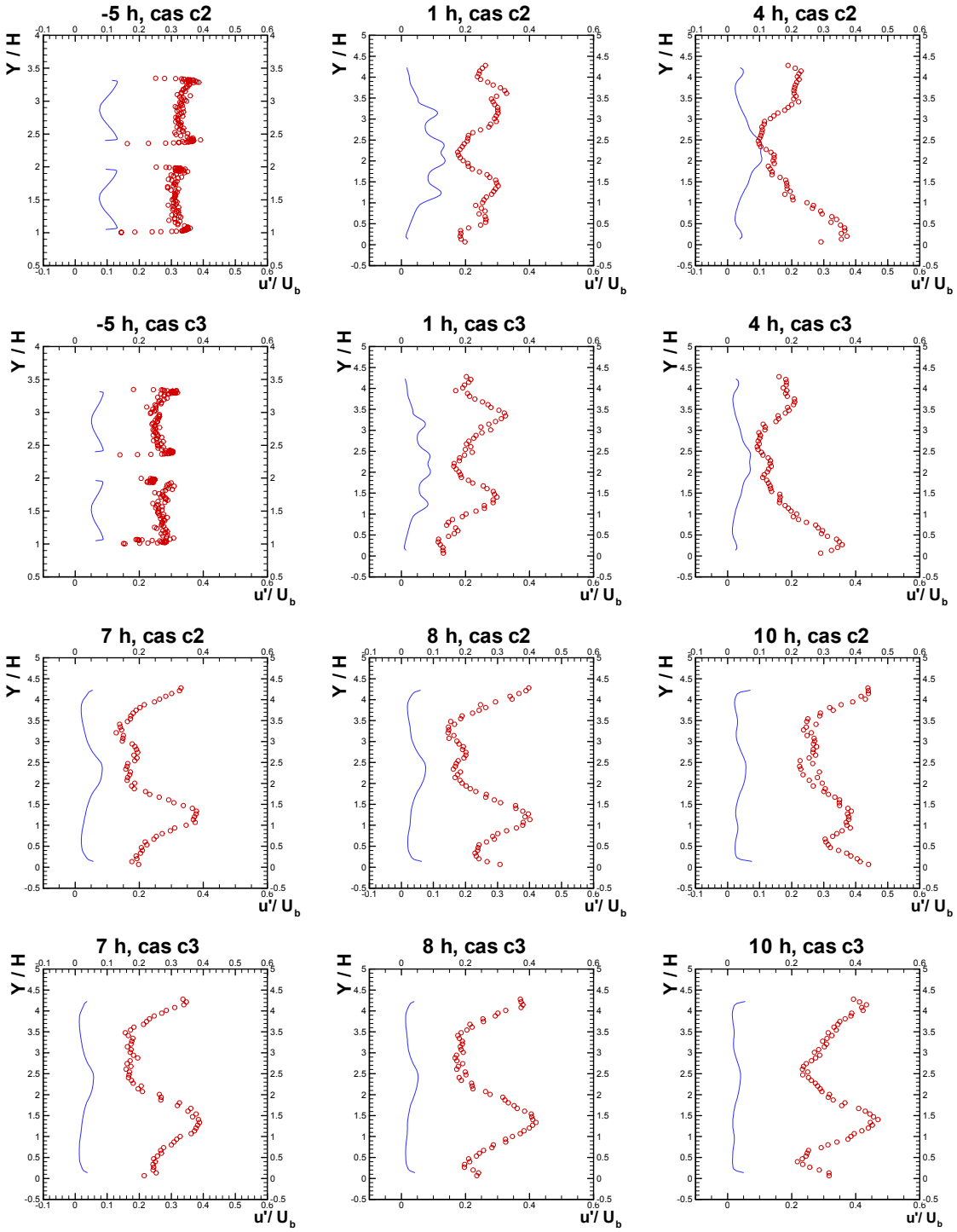

FIG. 7.33 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ○) de la moyenne $\bar{u'}$ des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

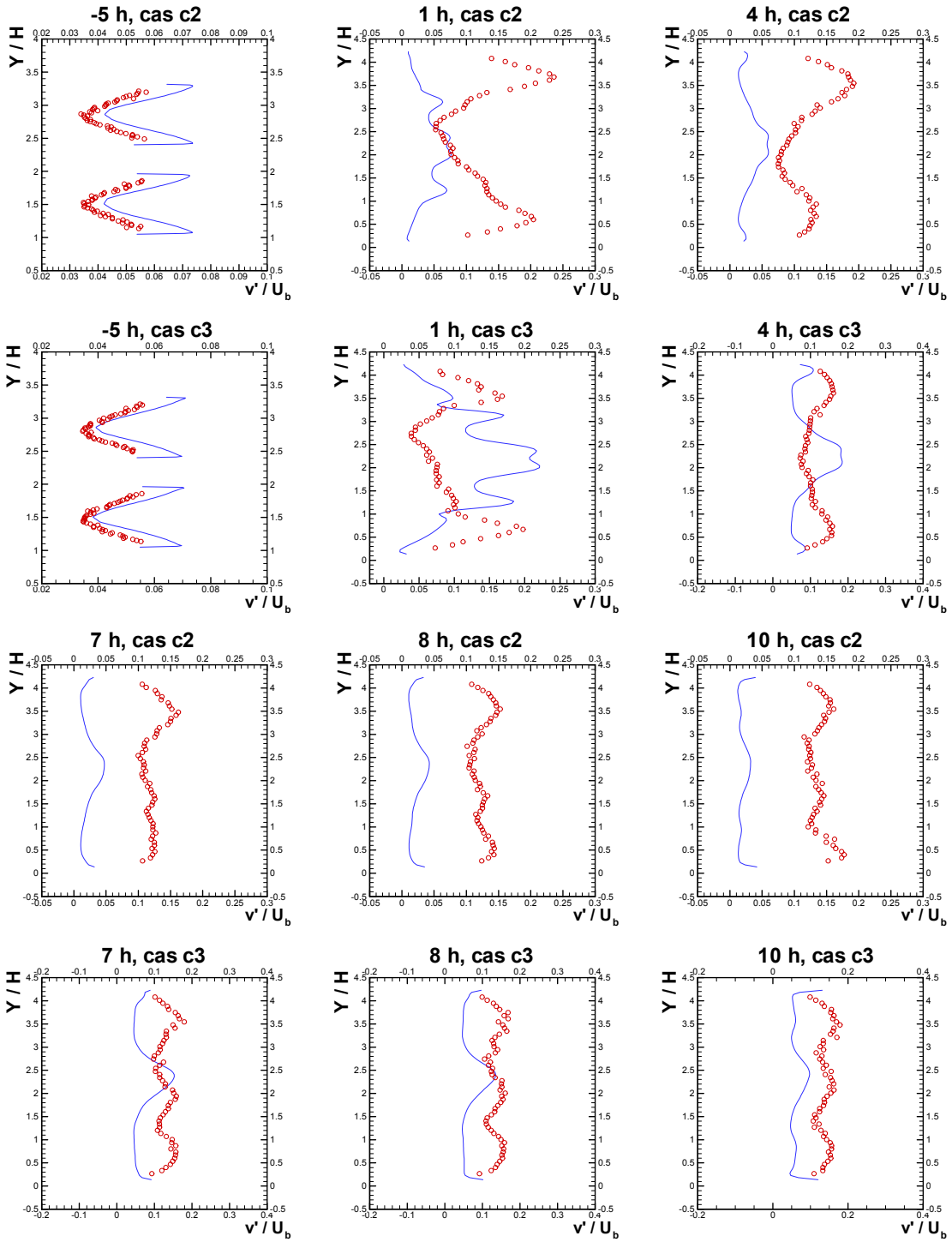

FIG. 7.34 – Évolution longitudinale, entre $x = 4h$ et $x = 10h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la moyenne $\bar{v'}$ des fluctuations de la composante normale de la vitesse moyenne normalisée par la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

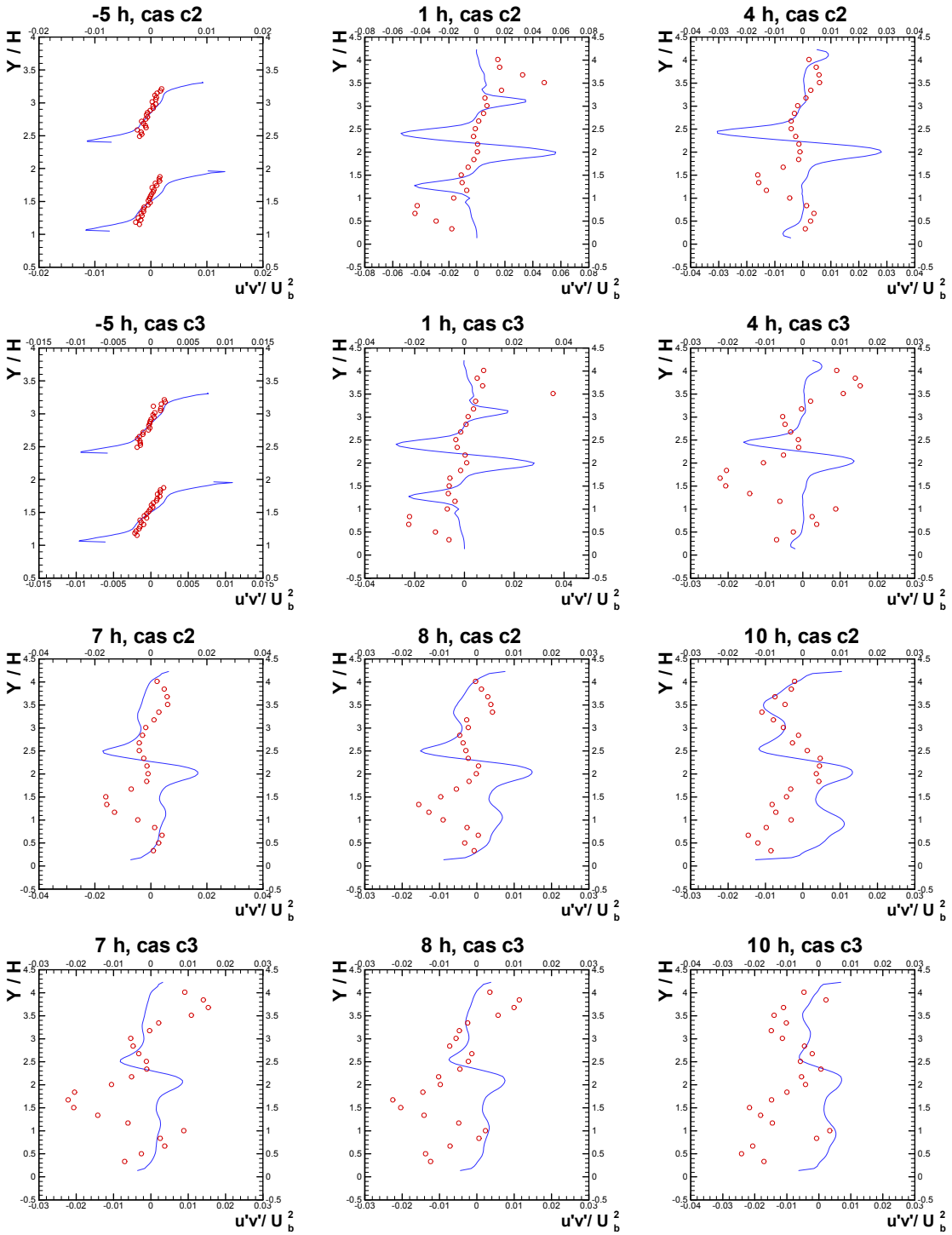

FIG. 7.35 – Évolution longitudinale, entre $x = -5h$ et $x = 3h$, des profils numériques (Traits continus) et expérimentaux (Symboles ∘) de la contrainte moyenne de cisaillement $\bar{u'v'}$ normalisée par le carré de la vitesse débitante U_b ($U_b = 11\ m/s$).

la présentation des divers champs ou profils nous a permis de mettre en évidence. On observe tout d'abord que par rapport aux écoulements inertes, on assiste à une nette dégradation de la qualité des prévisions de nos simulations. L'illustration la plus immédiate concerne le niveau des fluctuations de la composante longitudinale de la vitesse.

Écart entre résultats numériques et expérimentaux en % de U_b pour $\bar{U}$, $\bar{V}$, $\overline{u'}$, $\overline{v'}$ et de U_b^2 pour $\overline{u'v'}$												
		Canal		Chambre de combustion								
		Sup.	Inf.	Profils à l'abscisse $x =$								
		$-5h$		$0h$	$1h$	$2h$	$3h$	$4h$	$7h$	$8h$	$9h$	$10h$
$\bar{U}$	c_1	4,7	7,1	6,0	10,2	7,1	5,4	7,0	9,7	13,0	19,6	27,2
	c_2	5,1	7,4	7,0	13,3	12,4	12,5	13,0	19,8	24,2	29,0	33,3
	c_3	5,7	9,3	8,1	14,5	13,0	13,6	15,4	28,7	31,9	35,5	39,5
	h_1	1,8	1,5	4,2	10,3	10,8	9,7	7,6	4,0	5,8	8,9	12,9
	m_1	1,3	2,6	7,1	9,0	8,7	8,1	7,2	5,6	6,2	6,6	7,9
$\bar{V}$	c_1	0,8	0,9	1,1	6,7	3,6	3,7	3,6	4,4	3,8	2,9	2,7
	c_2	0,9	0,7	1,3	3,1	4,1	5,3	4,9	6,4	6,5	6,2	6,5
	c_3	1,1	0,9	1,1	6,3	5,4	5,2	4,9	7,4	8,9	9,7	9,7
u'	c_1	18,7	20,2	11,8	14,8	16,1	11,7	9,6	10,7	12,4	14,9	19,1
	c_2	23,2	21,2	16,9	17,8	18,5	16,5	14,2	18,5	21,0	24,7	28,1
	c_3	19,6	19,1	17,4	16,8	16,8	14,6	14,0	22,6	24,2	27,9	30,4
	h_1	1,3	2,0	2,7	5,2	7,8	7,9	6,8	6,1	7,0	8,1	9,8
	m_1	1,4	1,4	3,0	6,1	7,2	6,8	6,5	4,0	3,6	3,5	3,6
v''	c_1	0,5	0,5	0,8	6,8	6,0	5,3	5,0	5,6	6,1	6,9	7,6
	c_2	1,0	0,9	1,1	–	8,6	8,8	9,1	10,0	10,3	10,9	12,0
	c_3	0,7	0,7	0,7	7,8	6,9	6,2	6,4	6,8	7,1	7,6	7,7
$u'v'$	c_1	0,1	0,1	0,2	2,0	1,9	1,2	0,7	0,6	0,9	0,9	0,8
	c_2	0,1	0,2	0,3	2,2	2,1	1,4	0,9	0,8	0,8	0,8	0,8
	c_3	0,1	0,1	0,3	1,0	1,2	0,9	1,0	1,0	1,0	0,8	1,1

TAB. 7.6 – Simulation numérique des écoulements réactifs : écart quantitatif entre nos résultats de calcul et les données expérimentales de Nguyen [54] pour tous les cas considérés.

Alors que pour l'écoulement inerte nc_1, nous obtenions des écarts de l'ordre de 2 à 4 %, ceux-ci vont de 10 à 20 % pour l'écoulement c_1, soit de l'ordre de cinq fois plus ! Au niveau de cette même grandeur, on note également un clivage assez net entre d'une part, les écoulements c_1, c_2, c_3, et d'autre part, les écoulements h_1 et m_1. Pour ces derniers en effet, l'expérimentation a montré que la contribution du mouvement cohérent était notablement moins importante que

pour le premier groupe d'écoulements et nous observons de notre côté, que les écarts avec les résultats expérimentaux observés pour ces deux écoulements sont bien moindres (jusqu'à trois fois moins importants) que ceux obtenus pour les écoulements c_1, c_2, et c_3. Ceci conforte notre analyse des causes possibles des écarts que nous avons observés comme étant liés en grande partie à l'incapacité intrinsèque de ce type d'approche à capturer les effets liés à la présence d'un mouvement cohérent très énergétique.

Chapitre 8

Conclusion et perspectives

Dans ce travail purement numérique, nous avons présenté notre contribution à l'étude des écoulements turbulents inertes et réactifs stablisés en aval d'un élargissement brusque symétrique. Les modèles utilisés pour la turbulence et la combustion étant des modèles matures et notre contribution a donc consisté à permettre une évaluation aussi précise que possible des "performances" de prévision de ces modèles dans la situation d'écoulements académiques considérés. Nous avons bénéficié de la disponibilité d'une base de données expérimentales exhaustives pour procéder à des estimations quantitatives d'écart entre simulations numériques et résultats expérimentaux. La diversité des écoulements que nous avons simulés permet de dégager des tendances de fond quant à l'adéquation de la modélisation physique employée au calcul de tels écoulements. Nous avons observé en particulier que :

- Pour les écoulements inertes : les résultats peuvent être considérés comme très corrects, si l'on rapporte en particulier le niveau de précision observé au côté "peu sophistiqué" du modèle de turbulence employé. La structure d'ensemble des écoulements est bien reproduite ainsi que l'évolution spatiale des fluctuations de vitesse. La recherche des propriétés de similitude des couches de cisaillement et du sillage de la plaque séparant les deux écoulements incidents a été également réalisée à partir du traitement de nos résultats "bruts" de calcul. Des caractéristiques de similitude assez semblables à celles observées expérimentalement ont alors été mises en évidence.
- Pour les écoulements réactifs : les résultats obtenus sont corrects en ce qui concerne la structure moyenne des écoulements simulés. En revanche, l'estimation des diverses tensions de Reynolds n'est pas précise. Nous avons attribué ce comportement au fait que les écoulements simulés, comme l'ont révélé les études expérimentales qui leur ont été consacrées, étaient le siège d'un mouvement cohérent particulièrement énergétique. En conséquence, il serait intéressant d'observer dans le futur si, en "enlevant" la contribution du mouvement périodique aux fluctuations des vitesses, nous obtiendrions un meilleur accord avec les résultats de nos simulations qui, compte-tenu de l'approche RANS stationnaire retenue, ne

fournissent que les fluctuations associées au seul mouvement stochastique. Nos résultats ont également montré que dans le cas des écoulements réactifs présentant un différentiel de richesse incidente, la couche de mélange scalaire était suffisamment mince pour que dans la zone proche de l'élargissement brusque, la combustion se développe au sein d'un prémélange de richesse constante. La recherche des propriétés de similitude a montré, pour les écoulements à richesse constante considérés, que la zone de sillage initial voyait ses propriétés de similitude "renforcée", alors que dans les couches de cisaillement, la présence des fronts de réaction conduisait à ne pas pouvoir observer de comportement auto-semblable dans le cadre de l'utilisation d'une hypothèse de masse volumique constante.

Nous avons fourni dans tous les cas où nous disposions de données expérimentales, des données chiffrées quantitatives destinées à permettre d'évaluer, dans le futur, le gain effectif apporté par une autre approche de modélisation. Compte-tenu des résultats que nous avons obtenus, il nous semble qu'une approche de type simulations des grandes échelles serait intrinsèquement mieux à même de capturer les propriétés d'instationnarité de ces écoulements, tout au moins dans les situations où le mouvement cohérent à grande échelle prédomine. Le recours à une approche RANS de type instationnaire (URANS) pourrait également être envisagée mais cette dernière se heurterait très certainement à une difficulté de prise en compte de la non mono-harmonicité du mouvement cohérent.

Bibliographie

[1] C. Bailly and G. Compte-Bellot. Turbulence. *Sciences et techniques de l'ingénieur.*, 2003. CNRS Éditions, Paris.

[2] J. Baranger. Analyse numérique. *Collection enseignement des sciences*, 38, 1991. Hermann.

[3] R.M. Beam and R.F. Warming. An implicit factored scheme for the compressible Navier-Stokes equations. *AIAA Journal*, 16(4) :393–402, 1978.

[4] M. Besson. Étude expérimentale d'une zone de combustion en écoulement turbulent stabilisée en aval d'un élargissement brusque symétrique. *Thèse de doctorat d'université*, 2001. Université de Poitiers.

[5] M. Besson, P. Bruel, and B. Deshaies. Presentation of the ENSMA contribution. *Technical report, Brite EURAM III*, 1999. Contract No BRPR-CT95-0109 LES4LPP.

[6] P. Bigot. Contribution à l'étude de la combustion des mélanges turbulents réactifs à richesse variable : application à la combustion stabilisée par un élargissement brusque. *Thèse de doctorat d'université*, 2000. Université de Poitiers.

[7] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. Transport phenomena. *Wiley Editions*, 2001. 2nd edition.

[8] R. Borghi and M. Champion. Modélisation et théorie des flammes. *Éditions Technip*, 2000. Paris.

[9] W.R. Briley and H. MacDonald. On the structure and use of linearized block implicit schemes. *Journal of Computational Physics*, 34, 1980.

[10] G.L. Brown and A. Roshko. On density effects and large structure in turbulent mixing layers. *Journal of Fluid Mechanics*, 64 :775–816, 1974.

[11] P. Bruel. Étude numérique des écoulements turbulents dans un canal 2-d avec injection pariétale d'un mélange réactif. *Thèse de doctorat d'université*, 1988. Université de Poitiers.

[12] P. Bruel, S. Duplantier, and S. Sanquer. Développement d'un modèle probabiliste d'écoulement réactif turbulent et application à la stabilisation d'une zone de combustion par un obstacle. *Rapport DRET*, (91/050), 1994.

[13] P. Bruel, D. Karmed, and M. Champion. A pseudo-compressibility method for reactive flows at zero Mach number. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 7(4) :291–310, 1996.

[14] P. Bruel and P.D. Nguyen. Generic validation tests. *Technical Reports*, 2002-2003. Deliverables D3.9, D3.12-2, Contrat MOLECULES G4RD-CT-2000-0402.

[15] N.W. Chase Jr. NIST-JANAF, thermochemical tables. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 9, 1998. Fourth edition, Part I, Al-Co. Part II, Cr-Zr.

[16] P. Chassaing. Turbulence en mécanique des fluides : Analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur. *Cépaduès éditions*, 2000.

[17] K. Chien. Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-Reynolds-number turbulence model. *AIAA Journal*, 20(1) :33–38, 1982.

[18] D. Choi and C.L. Merkle. Application of time-iterative schemes to incompressible flow. *AIAA Journal.*, 23(10) :1518–1524, 1985.

[19] A.J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2 :12–26, 1967.

[20] G. Comte-Bellot. Écoulements turbulents entre deux plaques parallèles. *Thèse de doctorat d'état*, 1963. Université de Grenoble.

[21] S.M. Correa. Power generation and aeropropulsion gas turbines : from combustion science to combustion technology. *27th Symposium (International) on Combustion*, pages 1793–1807, 1998.

[22] C. Corvellec. Étude numérique et analytique des caractéristiques propagatives d'une zone de combustion se développant au sein d'un écoulement turbulent prémélangée modélisée par une approche de type flammelette. *Thèse de doctorat d'université*, 1998. Université de Poitiers.

[23] C. Corvellec, P. Bruel, and V.A. Sabel'nikov. A time-accurate scheme for the calculations of unsteady reactive flows at low Mach number. *International Journal for Numerical Methods in Fluids.*, 29 :207–227, 1999.

[24] C. Corvellec, P. Bruel, and V.A. Sabel'nikov. Turbulent premixed flames in the flamelet regime : Burning velocity spectral properties in the presence of countergradient diffusion. *Combustion and Flame.*, 120 :585–588, 2000.

[25] W.M.C. Dourado, P. Bruel, and J.L.F. Azevedo. A time-accurate pseudo-compressibility approach based on unstructured hybrid finite volume techniques applied to unsteady turbulent premixed flame propagation. *International Journal for Numerical Method in Fluids.*, 14(10) :1063–1091, 2004.

[26] L. Duchamp dela Geneste. Simulation des grandes échelles d'écoulements compressibles et réactifs sur maillages non-structurés. *Thèse de doctorat d'université*, 1999. École Centrale de Lyon.

[27] A. Ducrot. Problèmes elliptiques dans des domaines bornés et propagation d'ondes de réaction-diffusion. *Thèse de doctorat d'université*, 2004. École Centrale de Lyon.

[28] Favre. La turbulence en mécanique des fluides. *Gauthier-villars.*, pages 1–243, 1977.

[29] F. Fichot, F. Lacas, D. Veynante, and S. Candel. One-dimensional propagation of a premixed turbulent flame with a balance equation for the flame surface density. *Combustion Science and Technology*, 90 :35–60, 1993.

[30] C.A.J. Fletcher. Computational techniques for fluid dynamics : fundamental and general techniques. *Springer-Verlag*, Volume 1, 1988.

[31] C.A.J. Fletcher. Computational techniques for fluid dynamics : specific techniques for different flow categories. *Springer-Verlag*, Volume 2, 1988.

[32] R. Fox. Computational models for turbulent reacting flows. *Cambridge University Press*, 2003.

[33] J. Francescatto. Modèles bas Reynolds appliqués à une couche limite compressible. *INRIA Rapport No.2837*, 1996.

[34] S.M. Frolov, V.Y. Basevich, and A.A. Belyaev. Mechanism of turbulent flame stabilization on a bluff-body. *Chem. Phys. Reports*, 18(8) :1495–1516, 2000.

[35] O. Guerriau. Modélisation et simulation par éléments finis et volumes finis d'écoulements turbulents avec prise en compte de modèles de proche paroi. *Thèse d'Université*, 2000. École Centrale de Lyon.

[36] H. Ha Minh and A. Kourta. Semi-deterministic turbulence modelling for flows dominated by strong organised structures. *9th Symposium On Turbulent Shear Flow*, pages 10–5, 1993. Kyoto, Japon.

[37] K. Hanjalic and B.E. Launder. Fully developped asymetric flow in a plane channel. *Journal of Fluid Mechanics*, 1972.

[38] C. Hirsch. Numerical computation of internal and external flows : Computational methods for inviscid and viscous flows. *John Wiley and Sons*, Volume 2, 1995.

[39] C. Hirsch. Numerical computation of internal and external flows : Fundamentals of numerical discretization. *John Wiley and Sons*, Volume 1, 1995.

[40] A.K.M.F. Hussain and W.C. Reynolds. The mechanics of an organized wave in turbulent shear flow. Part 2 : experimental results. *Journal of Fluid Mechanics*, 52(2) :241–261, 1972.

[41] W.P. Jones and B.E. Launder. The prediction of laminarization with a two equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Tranfer*, 15 :301–314, 1972.

[42] D. Karmed, H. Lahjaily, P. Bruel, and M. Champion. Influence of the turbulent Damköhler number on the structure of premixed flames in a stagnation flow. *Combustion Science and Technology*, 113-114 :351–365, 1996.

[43] A. Kaufmann. Vers la simulation des grandes échelles en formulation euler-euler des écoulements réactifs diphasiques. *Thèse d'Université*, 2004. Institut National Polytechnique de Toulouse.

[44] J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluids Mechanics*, 177 :133–166, 1987.

[45] A. Kolmogorov, I. Petrovskii, and N. Piskunov. Study of the diffusion equation with growth of the quantity of matter and its application to a biology problem. *Bull.MGU, Moscow State University, USSR*, 1(6), 1937. Section A.

[46] H. Lahjaily. Introduction de la dilution dans la modélisation de la combustion turbulente pour les mélanges pauvres : Application à une flamme stabilisée dans un écoulement à point d'arrêt. *Thèse de doctorat d'université*, 1998. Université de Poitiers.

[47] J. Laufer. The structure of turbulence in fully developped pipe flow. *NACA TN 2954*, 1950.

[48] V. Legat. Introduction aux éléments finis. *Université catholique de Louvain*, 2004.

[49] P.A. Libby and F.A. Williams. Turbulent reacting flows. *Topics in Applied Physics, Springer Verlag*, 44 :1–243, 1981.

[50] P.A. Libby and F.A. Williams. A presumed PDF analysis of partially premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 161 :351–390, 2000.

[51] A.N. Lipatnikov and J. Chomiak. Turbulent flame speed and thickness : Phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 :1–74, 2002.

[52] O. Louedin and G. Billet. Study of energy transfers in a transient high speed flow with 2d large eddy simulation based on temporal filter. *First AFOSR International Conference on DNS and LES*, 1997. Ruston, USA.

[53] P.R. Mchugh and J.D. Ramshaw. Damped artificial compressibility iteration scheme for implicit calculations of unsteady incompressible flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 21 :141–153, 1995.

[54] P.D. Nguyen. Contribution expérimentale à l'étude des caractéristiques instationnaires des écoulements turbulents réactifs prémélangés stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique. *Thèse de doctorat d'université*, 2003. Université de Poitiers.

[55] P.D. Nguyen and P. Bruel. Turbulent reacting flow in a dump combustor : some specific aspects related to the modelling of turbulent transports. *19th ICDERS*, 109, 2003. Hakone, Japon, ISBN4-9901744-0-2 C3053 and ISBN4-9901744-1-0 C3053.

[56] P.D. Nguyen and P. Bruel. Écoulements turbulents réactifs stabiliés en aval d'un élargissement brusque symétrique : détermination expérimentale de l'influence du nombre de Reynolds sur la contribution des mouvements cohérents et stochastiques à la dynamique du champ de vitesse. *16ème Congrès Français de Mécanique*, 2003.

[57] N. Peters. Turbulent combustion. *Cambridge University Press*, 2000.

[58] R. Peyret. Unsteady evolution of horizontal jet in a stratified fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 78(1) :49–63, 1976.

[59] R.W. Pitz and J.W. Daily. Combustion in a turbulent mixing layer formed at a rearward-facing step. *AIAA Journal*, 21(11) :1565–1570, 1983.

[60] Th. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and numerical combustion. *Edwards*, 2001.

[61] T.J. Poinsot, D. Veynante, and S. Candel. Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams. *Journal of Fluids Mechanics*, 1991.

[62] S.B. Pope. Turbulent flows. *Cambridge University Press*, 2000.

[63] F. Ravet, C. Baudoin, and J.L. Schultz. Modélisation numérique des écoulements réactifs dans les foyers de turboréacteurs. *Revue Général Thermique*, 36 :5–16, 1997.

[64] W.C. Reynolds. The element potential method for chemical equilibrum analysis : Implementation in the interactive program STANJAN. *Departament of mechanical Engineering*, pages 1–48, 1988. Stanford, CA. 94305.

[65] W. Rodi. Examples of turbulence models for incompressible flows. *AIAA Journal*, 20(07) :872–879, 1982.

[66] P.L. Roe. Approximate Riemann solvers, parameter vectors and difference schemes. *Journal of computational physics*, 43 :357–372, 1981.

[67] S.E. Rogers and D. Kwak. Upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible Navier-Stokes equations. *AIAA Journal*, 28(2) :253–262, 1990.

[68] H. Schlichting. Boundary layer theory. *Mc Graw-Hill.*, 1968. Third edition.

[69] SIMULOG. Projet N3s-Natur, manuel théorique. *N3SNATUR/DOC/062/1.0*, Volume 1, 2002.

[70] SIMULOG. Projet N3s-Natur, manuel utilisateur. *N3SNATUR/DOC/063*, Volume 1, 2002.

[71] W.Y. Soh. Time-marching solution of incompressible Navier-Stokes equations for internal flow. *Journal of Computational Physics*, 70 :232–252, 1987.

[72] W.Y. Soh and J.W. Goodrich. Unsteady solution of incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 79 :113–134, 1988.

[73] J.L. Steger and P. Kutler. Implicit finite-difference procedure for the computation of vortex wakes. *AIAA Journal*, 15(4), 1977.

[74] E.F. Toro. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, A practical introduction. *Éditions Springer-Verlag*, 1999. 2nd edition.

[75] B. Tourniaire. Simulation numérique des flammes turbulentes de prémélange et de diffusion. Application aux foyers aéronautiques. *Thèse de doctorat d'université*, 1995. École centrale de Lyon.

[76] K. Truffin. Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé. *Thèse de doctorat d'université*, 2005. Institut National Polytechnique de Toulouse.

[77] E. Turkel. Review of preconditioning methods for fluids dynamics. *Applied Numerical Mathematics*, 12 :257–284, 1993.

[78] E. Turkel, V.N. Vatsa, and R. Radespiel. Preconditioning methods for low speed flows. *AIAA Paper 96-2460.*, pages 1–19, 1996. Procedings of the 14th AIAA Applied Aerodynamics Conference.

[79] S.R. Turns. An introduction to combustion : Concepts and applications. *McGraw Hill International Editors*, 1996. Mechanical Engineering Series.

[80] M. Vinokur. On one-dimensional stretching functions for finite-difference calculations. *Journal of Computational Physics*, 50, 1983.

[81] C. Viozat. Implicit upwind schemes for low Mach number compressible flows. *INRIA Rapport*, (3084) :1–67, 1997.

[82] C. Viozat. Calcul des écoulements instationnaires à petit nombre de Mach et en maillages étirés. *Thèse de doctorat d'Université*, 1998. Université de Nice-Sophia Antipolis.

[83] F.A. Williams. Combustion theory. *Benjamin Cummings*, 1985.

Troisième partie

Annexes

Annexe A

Équations instantanées de l'aérothermochimie

• **Hypothèses générales**. Les équations instantanées aérothermiques de conservation des différentes grandeurs décrivant les écoulements turbulents réactifs, sont la traduction mathématique des lois physiques de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie[1], appliquées à un volume de contrôle. Elles s'établissent dans le cadre de la mécanique des milieux continus dans lequel on suppose que les fluides sont constitués de particules dont le libre parcours moyen est petit par rapport à la longueur caractéristique de l'écoulement[2].

Dans le cadre de notre travail, nous retenons par ailleurs les hypothèses selon lesquelles sont négligeables :

- l'influence des forces extérieures (notamment de la pesanteur),
- l'influence de la viscosité volumique,
- la diffusion des espèces chimiques induite par les gradients de température (effet *Sorêt*),
- le flux de chaleur induit par les gradients de chaleur (effet *Dufour*),
- l'influence des gradients de pression $\vec{\nabla} p/p$ (et donc notamment de la barodiffusion qui représente la diffusion des espèces chimiques induite par ces gradients),
- l'influence du rayonnement considéré négligeable par rapport au transport convectif et diffusif turbulent,

• **Equation d'état**. Un système en équilibre thermodynamique, peut être complètement décrit et caractérisé, par deux variables thermodynamiques d'état indépendantes, soit par exemple la pression p et le volume spécifique v ou de façon équivalente la pression et la masse volumique ρ. Toutes les variables thermodynamiques d'état sont déterminées lorsque deux d'entre elles sont

[1] Ces équations sont données dans plusieurs références, le lecteur intéressé peut consulter des ouvrages tels que le livre de *Williams* [83], ou celui de *Bird*, *Stewart* et *Lightfoot* [7],pour plus des précisions.

[2] Le nombre sans dimension de *Knudsen* qui exprime le rapport entre ces deux quantités $Kn = \frac{\iota}{\Gamma}$ est considéré très petit par rapport à l'unité.

connues. On appelle loi d'état l'équation reliant les variables d'état entre elles. Dans le cadre de notre étude, nous retenons l'hypothèse de gaz parfait selon laquelle la loi d'état s'écrit, si le fluide est considéré comme ne contenant qu'une unique espèce chimique, selon :

$$p = \rho \frac{\mathcal{R}}{M} T \tag{A.1}$$

où $\mathcal{R}$ est la constante universelle des gaz parfaits et M est la masse molaire du gaz considéré. Le fluide est par ailleurs considéré comme étant calorifiquement parfait. L'énergie interne e peut donc se réexprimer selon :

$$e = \frac{pv}{\gamma - 1} \tag{A.2}$$

où γ est le rapport des chaleurs spécifiques $\frac{Cp}{Cv}$ considéré constant. Pour les écoulements multiespèces que nous considérons, nous supposons alors que le fluide reste un mélange de gaz parfaits, soit :

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{Y_\alpha}{\mathcal{M}_\alpha} \tag{A.3}$$

où $Y_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho}$ est la fraction massique de l'espèce α.

• **Lois de comportement**. Dans le cadre de ce travail, nous supposons que la viscosité moléculaire de chaque espèce ne dépend que de la température du fluide et suit la loi empirique de Sutherland donnée par exemple par :

$$\mu(T) = \mu_o \sqrt{\frac{T}{T_o}} \frac{1 + S_{th}/T_o}{1 + S_{th}/T} \tag{A.4}$$

où $S_{th} = 110,4$ K et $\mu_o = 1,711.10^{-5}$ kg/ms. Pour déterminer la viscosité du mélange, nous utilisons la loi empirique de Wilke [7] donne par :

$$\mu_m = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{j=1}^{n} x_i \Phi_{ij}} \tag{A.5}$$

où

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{\mathcal{M}_i}{\mathcal{M}_j}\right)^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\mathcal{M}_i}{\mathcal{M}_j}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2 \tag{A.6}$$

où n le nombre des espèces chimiques dans la mélange, x_i, x_j et μ_i, μ_j et $\mathcal{M}_i$,$\mathcal{M}_j$ sont les fractions molaires, les viscosités (à T et p du système) et les masses molaires des espèces i et j respectivement.

Le flux de chaleur par conduction thermique sera décrit par la loi de Fourier, soit :

$$\vec{q_T} = -\lambda_T \vec{\nabla} T \tag{A.7}$$

où l'évaluation du coefficient de conductivité thermique λ_T est ramené à celle de la viscosité en introduisant le nombre de *Prandtl* P_r, soit :

$$\vec{q_T} = -\frac{\mu C_p}{P_r} \vec{\nabla} T \tag{A.8}$$

D'après les hypothèses ainsi énoncées et le choix de la loi d'état et des lois de comportement retenues, nous pouvons établir, dans une approche eulérienne, les équations de conservation.

• **L'équation de continuité**. Représentant le principe de la conservation de la masse, ce bilan est indépendant de la nature du fluide ou des forces agissant sur lui et énonce qu'il n'y a ni création ni destruction de la matière. La variation de la masse dans un volume de contrôle donné n'est par conséquent fonction que de la masse transportée par convection, soit :

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_S \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = 0 \tag{A.9}$$

où $\rho\vec{v}$ est le flux de masse par unité de volume.

L'application du théorème de "flux divergence" permet de transformer l'intégrale de surface en intégrale de volume et de déduire la forme différentielle valable dans les zones d'évolution continue des variables physiques, soit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \tag{A.10}$$

• **L'équation de bilan massique de l'espèce chimique** α.

A partir de l'équation de conservation de la masse A.10, l'équation de bilan massique de l'espèce chimique α s'exprime comme :

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_\alpha \vec{v}_\alpha = \omega_\alpha \tag{A.11}$$

ou ω_α, représente le taux de variation de la masse de l'espèce α par unité de temps et de volume dû aux différents processus chimiques. Dans le cas des mélanges, $\vec{v}_\alpha$ peut être décomposée en la somme d'une vitesse moyenne et d'une vitesse de diffusion, soit comme $\vec{v}_\alpha = \vec{v} + \vec{V}_\alpha$ où $\vec{V}_\alpha$ est la vitesse de diffusion de l'espèce α, ce qui donne :

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_\alpha \vec{v} + \nabla \cdot \rho_\alpha \vec{V}_\alpha = \omega_\alpha \tag{A.12}$$

De la définition de la fraction massique $Y_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho}$ de l'espèce α, A.12 peut s'exprimer en fonction de Y_α comme :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_\alpha \vec{v} + \nabla \cdot \left(\rho Y_\alpha \vec{V}_\alpha\right) = \omega_\alpha \tag{A.13}$$

On retient alors la loi de *Fick* pour exprimer le flux de diffusion, soit :

$$\rho Y_\alpha \vec{V}_\alpha = -\rho D_\alpha \nabla Y_\alpha \tag{A.14}$$

où D_α est le coefficient de diffusion binaire. L'équation de bilan massique de l'espèce chimique s'écrit finalement sous forme conservative :

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_\alpha \vec{v} = \nabla \cdot (D_\alpha \nabla \rho Y_\alpha) + \omega_\alpha \tag{A.15}$$

• **L'équation de bilan de quantité de mouvement**. Le deuxième principe évoqué est celui de la conservation de la quantité de mouvement. La deuxième loi de *Newton*, nous indique qu'au sein d'un volume de contrôle fixe, la variation de la quantité de mouvement par unité de temps est égale à la somme des toutes les forces agissant sur ce volume. Négligeant l'effet des forces volumiques, nous ne considérons alors que les forces de contact agissant sur la surface du volume de contrôle. En introduisant le tenseur de *Cauchy* $\overline{\overline{\sigma}}$ pour représenter ces forces de contact, le bilan s'écrit alors :

$$\int_v \frac{d\rho\vec{v}}{dt} dv = \oint_s \overline{\overline{\sigma}} ds \tag{A.16}$$

D'après *Stokes*, dans le cas des fluides newtoniens, il existe une relation linéaire entre le tenseur des contraintes $\overline{\overline{\sigma}}$ et le tenseur des déformations $\overline{\overline{\tau}}$ (la viscosité volumique étant négligée), soit :

$$\overline{\overline{\sigma}} = -p\overline{\overline{I}} + \overline{\overline{\tau}} \tag{A.17}$$

où $\overline{\overline{I}}$ est le tenseur identité et où les composantes du tenseur des déformation s'écrivent :

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) \delta_{ij} \right] \tag{A.18}$$

Le terme de contrainte isotrope induite par la pression est alors regroupé avec le terme de flux convectif issu du développement de la dérivée totale. Le bilan de quantité de mouvement sous forme intégrale peut ainsi s'écrire selon :

$$\int_V \left(\frac{\partial \rho\vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \left(\rho\vec{v} \otimes \vec{v} + p\overline{\overline{I}} \right) \right) dV = \int_S \overline{\overline{\tau}}.\vec{n} dS \tag{A.19}$$

L'application du théorème de Gauss à l'intégrale de surface des flux diffusifs permet alors de redériver la forme différentielle du bilan de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho\vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho\vec{v} \otimes \vec{v} = \vec{\nabla} \cdot \overline{\overline{\tau}} \tag{A.20}$$

• **Equation de l'énergie**. Cette équation représente le principe thermodynamique de la conservation de l'énergie qui établit la relation entre la chaleur, le travail et l'énergie. Dans le cas d'un gaz parfait, l'énergie totale $\mathcal{E}$ est définie par la somme de l'énergie interne e, et de l'énergie cinétique du fluide $\frac{1}{2}\vec{v} \otimes \vec{v}$, soit :

$$\mathcal{E} = e + \frac{1}{2}\vec{v} \otimes \vec{v} \tag{A.21}$$

De par l'hypothèse de gaz parfait retenue, nous rappelons que l'énergie interne ne dépend que de la température et peut être exprimée selon : $e = CvT + e_0$ ou se déduit de l'enthalpie

selon : où C_v et C_p ne dépendent eux aussi que de la température (gaz calorifiquement parfait). Pour le cas d'un mélange de gaz, l'énergie interne est donnée par :

$$e = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} Y_\alpha e_\alpha \tag{A.22}$$

où e_α représente l'énergie interne spécifique de l'espèce α. Les phénomènes de radiation et les forces volumiques étant négligées, la variation temporelle de l'énergie totale $\mathcal{E}$ résulte alors du travail des contraintes agissant sur le système et des flux conductifs de chaleur échangés avec le domaine extérieur. Son bilan s'écrit donc sous forme différentielle :

$$\frac{\partial \rho \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \mathcal{E}) = -\nabla \cdot p\vec{v} + \nabla \cdot \left(\overline{\overline{\tau}} \cdot \vec{v}\right) - \nabla \cdot \vec{q} \tag{A.23}$$

où le flux de chaleur par conduction est donné par la loi de *Fourier* : $\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T$ pour un fluide monoespèce. Dans le cas des mélanges multiespèces, ce flux de chaleur n'est plus seulement lié au gradient moyen de température mais aussi à la chaleur apportée par diffusion d'espèces (l'effet *Dufour* étant par ailleurs négligé. Il se réécrit selon *Williams* [83] :

$$\vec{q} = -\lambda \vec{\nabla} T + \rho \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha Y_\alpha \vec{V_\alpha} \tag{A.24}$$

L'équation de bilan de l'enthalpie totale. Une forme alternative de ce bilan qui sera utilisée se déduit directement en utilisant la définition de l'enthalpie totale : $h_t = e + \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}\vec{v} \otimes \vec{v} = h + \frac{1}{2}\vec{v} \otimes \vec{v} = \mathcal{E} + \frac{p}{\rho}$. Ce bilan d'enthalpie totale s'exprime alors de la façon suivante :

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \nabla \rho h_t \vec{v} = \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\overline{\overline{\tau}} \cdot \vec{v}\right) - \nabla \cdot \vec{q} \tag{A.25}$$

Pour un mélange de $\mathcal{N}$ espèces, l'enthalpie totale s'exprime selon :

$$h = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha Y_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \left(\int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT + h_\alpha^0 \right) Y_\alpha \tag{A.26}$$

où, par définition, l'enthalpie h_α de l'espèce chimique α, est formée de deux contributions, soit une partie sensible $\int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT$ et une autre partie chimique de référence h_α^0 appelée enthalpie de formation de l'espèce α.

Par ailleurs, pour le cas d'une mélange de $\mathcal{N}$ espèces, la chaleur spécifique à pression constante devient :

$$C_p = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} C_{p_\alpha} Y_\alpha \tag{A.27}$$

Le gradient de h_t peut alors s'écrire comme : $\nabla h_t = \nabla \left(\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha Y_\alpha + \frac{1}{2}\vec{v} \otimes \vec{v} \right) = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha \nabla Y_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} Y_\alpha \nabla h_\alpha + \frac{1}{2}\nabla \left(\vec{v} \otimes \vec{v}\right)$

Le flux de chaleur (toujours en négligeant le rayonnement et l'effet Dufour) se réexprime alors en fonction de l'enthalpie totale selon :

$$\vec{q} = \underbrace{-\frac{\lambda}{C_p}\left[\nabla h_t - \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha \nabla Y_\alpha - \frac{1}{2}\nabla\left(\vec{v}\otimes\vec{v}\right)\right]}_{\text{conduction thermique}} + \underbrace{\rho\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} h_\alpha Y_\alpha \vec{V_\alpha}}_{\text{transport par diffusion d'espèces}} \tag{A.28}$$

En faisant l'hypothèse que le nombre de *Lewis Le*=1 et donc que $\rho D = \frac{\lambda}{C_p}$, l'équation de bilan de l'enthalpie totale s'écrit finalement comme :

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \nabla \rho h_t \cdot \vec{v} = \nabla\left[\rho D\left(\nabla h_t - \frac{1}{2}\nabla\left(\vec{v}\otimes\vec{v}\right)\right)\right] - \nabla\cdot\left(\overline{\overline{\tau}}\cdot\vec{v}\right) - \nabla\left[\sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}}\left(\frac{\lambda}{C_p} - \rho D_\alpha\right) h_\alpha \nabla Y_\alpha\right] \tag{A.29}$$

Bilan. Finalement, l'ensemble des équations aérothermochimiques que nous utilisons en repère cartésien (en utilisant la convention d'Einstein des indices répétés) sont données par :

• L'équation d'état

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{Y_i}{M_i}. \tag{A.30}$$

• L'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0 \tag{A.31}$$

• L'équation de bilan massique de l'espèce α

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i Y_\alpha}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}\right) + w_\alpha, \qquad i = 1, ..., \mathcal{N}\ , \tag{A.32}$$

• L'équation de bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho v_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i v_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \qquad \alpha = 1, 2, 3\ , \tag{A.33}$$

avec

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu\left(\frac{\partial v_\kappa}{\partial x_\kappa}\right)\delta_{ij}$$

• L'équation de bilan de l'énergie totale

$$\frac{\partial \rho \mathcal{E}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i \mathcal{E})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\lambda\frac{\partial T}{\partial x_i} + v_i \tau_{ij}\right] + w_T \tag{A.34}$$

• L'équation de bilan de l'enthalpie totale

$$\frac{\partial \rho H_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i H_t}{\partial x_i} =$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial H_t}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D \frac{\partial v_i^2}{\partial x_i}\right) - \frac{\partial v_j \tau_{ij}}{\partial x_i} - \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\frac{\lambda}{C_p} - \rho D_\alpha\right) h_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i}\right] \tag{A.35}$$

avec

$$H_t = \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} \left(\int_{T_0}^{T} C_{p_\alpha} dT + h_\alpha^0\right) Y_\alpha + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} v_i^2$$

Annexe B

Le schéma global à une seule réaction chimique la combustion des mélanges air+propane

Considérons l'équation d'une réaction irréversible globale à une seule étape de la combustion complète d'un hydrocarbure C_xH_y. Dans le cadre d'une hypothèse de chimie rapide, *Williams* [83], *Peters* [57], *Libby et Williams* [49], [50] cette équation s'écrit :

$$\vartheta_{C_xH_y}C_xH_y + \vartheta_{O_2}O_2 + \vartheta_{N_2}N_2 \Longrightarrow \vartheta_{CO_2}CO_2 + \vartheta_{H_2O}H_2O + \vartheta_{N_2}N_2 \tag{B.1}$$

avec $\vartheta_{C_xH_y}$ et ϑ_{O2}, les coefficients stœchiométriques de carburant et de l'oxygène dans les réactifs, ϑ_{CO_2} et ϑ_{H_2O} les coefficients stœchiométriques de CO_2 et H_2O dans les produits et ϑ_{N_2} le coefficient stœchiométrique de l'élément inerte N_2.

Dans l'hypothèse où l'air est une mélange composé de 21% de O_2 et 79% de N_2 en volume (pour chaque mole de O_2 dans l'air, il y a 3.76 moles de N_2), le bilan de la réaction chimique à la stœchiométrie permet d'en déduire les coefficients stœchiométriques.

Ces coefficients, prennent les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned}
\vartheta_{C_xH_y} &= 1 \\
\vartheta_{O2} &= (x + \tfrac{y}{4})\vartheta_{C_xH_y} \\
\vartheta_{CO_2} &= x \\
\vartheta_{H_2O} &= y/2 \\
\vartheta_{N_2} &= 3.7619(x + \tfrac{y}{4})
\end{aligned}$$

L'équation (B.1) peut donc s'écrire de la façon suivante :

$$C_xH_y + (x + \frac{y}{4})(O_2 + 3.7619N_2) \Longrightarrow xCO_2 + \frac{y}{2}H_2O + 3.7619(x + \frac{y}{4})N_2 \tag{B.2}$$

A l'aide de l'équation (B.2) on peut déterminer la relation stœchiométrique air-carburant par :

$$\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)_{st} = \frac{(x+\frac{y}{4})(O_2+3.7619N_2)}{C_xH_y}$$

laquelle peut s'écrire de la façon suivante :

$$\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)_{st} = \vartheta_{st}\frac{\mathcal{M}_{air}}{\mathcal{M}_{C_xH_y}} \tag{B.3}$$

où $\mathcal{M}_{air}$ et $\mathcal{M}_{C_xH_y}$ sont respectivement les masses molaires de l'air et du carburant ; ϑ_{st} est le coefficient stœchiométrique, s'exprimant par :

$$\vartheta_{st} = (x+\frac{y}{4})(4.76)$$

Par ailleurs, le concept de richesse[1] est utilisé pour indiquer s'il s'agit d'un mélange riche ou pauvre en carburant. *Turns* [79] la définit par :

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)}{\left(\frac{m_{air}}{m_{C_xH_y}}\right)_{st}} \tag{B.4}$$

La définition de la fraction massique de l'espèce i :

$$Y_i = \frac{m_i}{m_1+m_2+...+m_i+...} = \frac{m_i}{m_{tot}}$$

peut aussi être exprimée en fonction des masses molaires des espèces chimiques, par la relation suivante :

$$Y_i = \frac{\mathcal{M}_i}{\mathcal{M}_{tot}} \tag{B.5}$$

En considérant les équations (B.3 - B.5), on peut exprimer la richesse en fonction des fractions massiques[2]. On en déduit :

$$\phi = \vartheta_{st}\frac{Y_{C_xH_y}}{Y_{ox}}\frac{\mathcal{M}_{ox}}{\mathcal{M}_{C_xH_y}} \tag{B.6}$$

L'équation (B.2) s'écrit schématiquement par la réaction globale :

[1] Définie comme le rapport des quantités de combustible et de carburant présent dans la mélange, divisé par la valeur de ce même rapport à la stœchiométrie. Le mélange stœchiométrique correspond donc par définition à la richesse 1.

[2] Par souci de clarté, le terme oxydant "ox" se rapporte ici à l'air. Alors que normalement on ne considère que l'oxygène comme oxidant. L'azote contenu dans l'air est considère comme inerte, mais participe à la masse totale de l'oxydant.

$$\overbrace{\underbrace{C_xH_y + \vartheta_{st}Ox}}^{R_{st}} \Longrightarrow P \tag{B.7}$$

où P représente l'ensemble des produits de la combustion et R_{st} désigne le mélange frais dans les conditions stœchiométriques. Le bilan de la réaction chimique à la stœchiométrie nous permet de déterminer la masse molaire de l'espèce P :

$$\mathcal{M}_P = \mathcal{M}_{C_xH_y} + \vartheta_{st}\mathcal{M}_{ox} \tag{B.8}$$

ainsi que les fractions massiques à la stœchiométrie :

$$\begin{aligned} Y_{C_xH_y} &= \frac{\mathcal{M}_{C_xH_y}}{\vartheta_{st}\mathcal{M}_{ox} + \mathcal{M}_{C_xH_y}} \\ Y_{ox} &= \frac{\vartheta_{st}\mathcal{M}_{ox}}{\vartheta_{st}\mathcal{M}_{ox} + \mathcal{M}_{C_xH_y}} \end{aligned} \tag{B.9}$$

Nous déduisons des équations (B.6-B.9), une relation entre la richesse et la fraction massique de combustible :

$$Y_{C_xH_y} = \frac{\phi}{\phi + \vartheta_{st}\frac{\mathcal{M}_{ox}}{\mathcal{M}_{C_xH_y}}} \tag{B.10}$$

Compte tenu de la composition de l'air, les fractions massiques de Y_{O_2} et Y_{N_2} sont liées par la relation suivante :

$$Y_{O_2} = 0.3036 Y_{N_2}$$

Dans le mélange réactif, les Y_i vérifient :

$$\sum_{i=1}^{n} Y_i = 1 \qquad soit \qquad Y_{C_xH_y} + Y_{N_2} + Y_{O_2} = 1$$

d'où l'expression de la fraction massique d'oxygène Y_{O_2}, et d'azote Y_{N_2} en fonction de celle de combustible $Y_{C_xH_y}$:

$$Y_{O_2} = 0.233(1 - Y_{C_xH_y}) \quad , \quad Y_{N_2} = 0.767(1 - Y_{C_xH_y}) \tag{B.11}$$

D'après l'équation (B.2), la réaction idéale du propane s'écrit de la façon suivante :

$$C_3H_8 + 5O_2 + 18.8N_2 \Longrightarrow 3CO_2 + 4H_2O + 18.8N_2 \tag{B.12}$$

où l'on considère que la masse atomique pour chacun des éléments est la suivante :

$$O = 15.9994,\ N = 14.0067,\ H = 1.00794,\ C = 12.011$$

En identifiant la fraction massique pour chaque élément, *Libby et Williams* [50] par :

$$\mathcal{Z}_{O_2} \Longrightarrow O_2, \qquad \mathcal{Z}_{H_2} \Longrightarrow H_2, \qquad \mathcal{Z}_C \Longrightarrow C$$

En utilisant l'équation (B.3) on a donc comme résultat :

$$\left(\frac{m_{air}}{m_c}\right)_{st} = 23.8\frac{(15.9994) + (14.007)}{(36.033) + (8.06352)} = 16.195 \tag{B.13}$$

La relation entre la fraction massique et la richesse peut s'établir en utilisant l'équation B.13 et la relation $\sum_{i=1}^{n} Y_i = 1$.

Et finalement obtenir, les relations suivantes entre la richesse ϕ et la fraction massique de combustible $Y_{C_3H_8}$ et celle-ci avec les fractions massiques d'oxygène Y_{O_2}, et d'azote Y_{N_2} :

$$Y_{C_3H_8} = \frac{\phi}{\phi + 15.5774} \quad , \quad Y_{O_2} = 0.233(1 - Y_{C_3H_8}) \quad , \quad Y_{N_2} = 0.767(1 - Y_{C_3H_8}) \tag{B.14}$$

Annexe C

Interpolation et fonctions linéaires des éléments finis triangulaires

La méthode des éléments finis consiste à rechercher une approximation u^h de la solution exacte u d'un problème aux dérivés partielles réécrit sous sa formulation variationnelle. Cette approximation s'écrit sous la forme[1] :

$$u^h(x) = \sum_{j=1}^{n} U_j, \varphi_i(x) \tag{C.1}$$

où U_j sont les valeurs nodales inconnues, tandis que φ_i sont des fonctions de forme spécifiée *a priori* et appartenant à l'espace [2] $\mathcal{U}$ et formant une base de cet espace. Ces fonctions de forme sont choisies afin qu'aucune d'entre elles ne puisse être obtenue par combinaison linéaire des autres.

Il y a n degrés de liberté pour définir une approximation particulière appartenant au sous-espace d'approximation discret $\mathcal{U}^h \subset \mathcal{U}$. La dimension $\mathcal{U}^h$ est n et les fonctions de forme sont une base de cette espace dont tous les éléments sont une combinaison linéaire unique des éléments de cette base. La plupart des fonctions de formes utilisées sont associées à un point particulier S_i de l'espace et satisfont la propriété :

$$\varphi_i(S_j) = \delta_{ij} \tag{C.2}$$

Les valeur nodales sont ainsi les valeurs de l'approximation de S_i, soit :

$$u^h(S_i) = \sum_{j=1}^{n} U_j, \varphi_i(S_i) \quad \Rightarrow \quad u^h(S_i) = \sum_{j=1}^{n} U_j, \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad u^h(S_i) = U_i \tag{C.3}$$

[1] *Legat, V.* [48] ; *Fletcher, C.A.J.* [30][31] ; *Baranger, J.* [2]

[2] Cet espace $\mathcal{U}$ se définit simplement comme étant le sous-ensemble des fonctions de l'espace où la formulation forte U_f des équations aux dérivés partielles est définie et qui s'annulent ou ont une valeur connue sur la frontière de U_f (conditions de *Dirichlet*).

Fonctions de forme locales du type $\mathcal{P}_1$

Les fonctions d'interpolation linéaire ou fonctions de forme locale du type $\mathcal{P}_1$, peuvent être représentées par un domaine triangulaire (un élément fini $\mathcal{P}_1$), dans $[0..1] \times [0..1]$, admettant trois fonctions d'interpolation $(\varphi_i)_{i=1..3}$, d'équations :

$$\varphi_i(\zeta, \xi) = a_i\zeta + b_i\xi + c_i \tag{C.4}$$

et vérifiant pour les trois sommets $(S_i)_{i=1..3}$ les relations :

$$\varphi_i\left(S_j\right) = \delta_{ij} \quad \varphi_i\left(S_j\right) \;=\; \begin{cases} 1 & \text{si}(i=j) \text{ si } S_i \in T_j \\ 0 & \text{si}(i \neq j) \text{ si } S_i \notin T_j \end{cases} \tag{C.5}$$

et

$$\sum_i \varphi_i\left(S_j\right) = 1 \tag{C.6}$$

Valeurs nodales et fonctions de forme locales

Pour obtenir facilement les fonctions de forme locales, considérons un isomorphisme entre l'élément triangulaire quelconque Ω_e[3] et l'élément parent triangulaire $\hat{\Omega}$ représenté sur la figure .C.1 et défini dans le plan $\Xi = (\zeta, \xi)$. Le triangle parent généralement utilisé dans la littérature est défini par les coordonnées de ses trois sommets qui sont respectivement $S_1 = [0, 0],\ S_2 = [1, 0],\ S_3 = [0, 1]$.

Considérons maintenant les trois sommets d'un élément triangulaire quelconque Ω_e, dont les coordonnées respectives sont $\mathcal{X}_1^e = (X_1^e, Y_1^e),\ \mathcal{X}_2^e = (X_2^e, Y_2^e),\ \mathcal{X}_3^e = (X_3^e, Y_3^e)$. La correspondance entre $\hat{\Omega}$ et Ω_e est alors donnée par :

$$x(\Xi) \;=\; (1 - \zeta - \xi)\,\mathcal{X}_1^e \;+\; \zeta\mathcal{X}_2^e \;+\; \xi\mathcal{X}_3^e \tag{C.7}$$

On observe immédiatement que $x(S_i) = \mathcal{X}_i$.

Pour définir une base de polynômes φ_i de degré $\mathcal{P}_1$ sur $\hat{\Omega}$, nous sélectionnons les trois nœuds S_i sur le triangle parent. A chaque nœud nous associons une fonction de la base, i.e. un polynôme de degré un vérifiant C.5 et nous obtenons ainsi une base locale des fonctions linéaires, soit :

$$\begin{cases} \varphi_1\left(\zeta, \xi\right) & = & 1 - \zeta - \xi \\ \varphi_2\left(\zeta, \xi\right) & = & \zeta \\ \varphi_3\left(\zeta, \xi\right) & = & \xi \end{cases}$$

cette base locale C.8 vérifiant C.6.

[3] l'index ou suffixe e, est un vrai index et là il ne doit pas être considéré que comme un indicateur d'élément, il va parcourir tout le domaine.

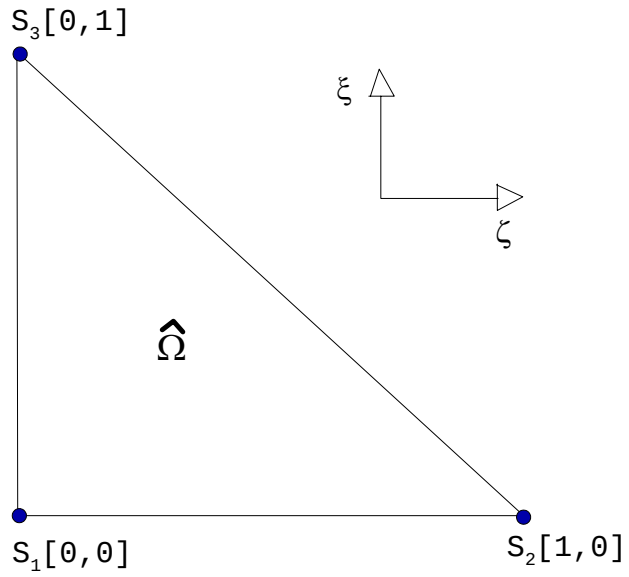

FIG. C.1 – Représentation schématique d'un élément triangulaire parent.

Un élément linéaire quelconque u^h, sur l'élément Ω_e, s'obtient ensuite par combinaison linéaire des fonctions de base de la façon suivante :

$$u^h(x) = \sum_{i=1}^{2} U_i^e \varphi_i^e(x), \qquad x \in \Omega_e \tag{C.8}$$

Pour une triangulation du plan $\mathbb{R}^2$, la base nodale $(\varphi_i(x,y))_{i=1..\varphi_i^e}$ est obtenue par recollement des bases nodales locales. Cette procédure assure la conformité de la représentation éléments-finis :

- Pour toute U_i^e fonction de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$, l'interpolée globale de U_i^e, noté u^h, doit au moins être de classe $\mathcal{C}^1$, ce qui est suffisant pour des systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles d'ordre deux.

L'interpolée de la fonction U_i^e admet finalement sur la base des fonctions nodales, une décomposition unique ayant pour expression :

$$u^h(x,y) = \sum_{i=1}^{N} U_i^e \varphi_i(x,y), \qquad \forall\ X(x,y)\ \in \Omega \tag{C.9}$$

où N est le nombre total de nœuds dans Ω.

Contribution à l'étude numérique des écoulements inertes et réactifs stabilisés par un élargissement brusque symétrique.

Résumé : Ce travail est consacré à la simulation numérique des écoulements inertes et réactifs stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique, alimenté par deux écoulements de canal pleinement développés d'air ou air+propane. L'objectif est, d'une part, de tester sur une géométrie *"simple"*, une modélisation de la combustion en écoulements turbulents et en régime de prémélange et, d'autre part, d'estimer le niveau de précision obtenue afin de pouvoir quantifier une éventuelle amélioration liée à l'utilisation de modèles plus sophistiqués. Le modèle de turbulence $k-\varepsilon$ sous sa forme standard avec la *loi de paroi*, et le modèle de combustion du type PDF présumé, modèle CLE, ont été retenus pour nos simulations. Une étude préliminaire du type KPP nous a permis de déduire les caractéristiques propagatives des zones de réactions moyennes à richesse constante, calculées sur la base du modèle de combustion retenu.

Dans ce travail, ont été simulés : trois écoulements inertes et trois écoulements réactifs à richesse constante pour nombres de Reynolds égaux à 25000, 50000 et 75000 et deux écoulements réactifs à richesse variable pour nombre de Reynolds 25000. Concernant les écoulements inertes, on retrouve bien la dissymétrie observée expérimentalement des deux zones de recirculation moyennes. Pour les écoulements réactifs à richesse constante, on retrouve également la resymétrisation de l'écoulement moyen observée expérimentalement. En revanche, la longueur des zones de recirculation moyenne est fortement sous-estimée par le calcul. Un comportement autosemblable dans la zone proche de l'élargissement est également retrouvé. Pour les écoulements à richesse variable, la perte de symétrie de l'écoulement moyen est bien retrouvée, mais les longueurs des zones de recirculation moyennes sont toujours sous-estimées par le calcul. Des indicateurs quantitatifs d'écart entre les résultats numériques et expérimentaux sont fournis pour les écoulements inertes et réactifs considérés, permettant à l'avenir, d'estimer le gain apporté par le recours à des simulations basées sur une évolution ou sur une amélioration de modèles physiques retenus de le cadre de cette étude.

Contribution to the numerical study of the inert and reactive flows stabilized by a symmetrical sudden expansion.

Abstract: This work is aimed at simulating the inert and reactive flows stabilized by a symmetrical sudden expansion and fed by two fully developed turbulent channel flows of air or air+propane. The objectives are, on one hand, to validate on a *simple* geometry, a rather standard modelling of turbulent premixed combustion and, on the other hand, to estimate the level of accuracy obtained in order to be able to quantify the potential improvement that could be brought by the use of more sophisticated models. The models used for our simulations were a standard $k-\varepsilon$ turbulence model with the *law of the wall*, and the CLE model (presumed PDF approach) of turbulent combustion. A preliminary study of KPP type enabled us to deduce the basic propagation properties of the mean reaction zones calculated on the basis of the retained turbulent combustion model. Three inert flows and three reactive flows with constant equivalence ratio and Reynolds numbers equal to 25,000, 50,000 and 75,000 are simulated along with two reactive flows with variable equivalence ratio and a Reynolds number equal to 25,000. Concerning the inert flows, the dissymmetry observed in the experiments between the two average zones of recirculation is well represented. For the reactive flows with constant equivalence ratio, the symmetry of the mean flow observed experimentally is also correctly predicted by the simulations. In return, the length of the two mean recirculation zones is strongly underestimated by the calculations. A self-similar behavior of the flows (wake and shear layers) close to the expansion is also evidenced. The loss of symmetry of the mean flow observed experimentally when an equivalence ratio difference is present between the two feeding streams is qualitatively recovered numerically, but the length of the mean recirculation zones are still underestimated by the calculations. Quantitative indicators of the difference between the numerical and experimental results are provided for the inert and reactive flows, giving the opportunity to assess, in the future, the improvement brought by the recourse to a more elaborated modelling of this kind of flows.

Discipline : Énergie, Thermique et Combustion. **Mots clés** : Chambres de combustion, Turbulence, Analyse numérique, Simulation Méthodes de.