



**HAL**  
open science

# Transition et turbulence des écoulements incompressibles à densité variable

Loïc Reynier

► **To cite this version:**

Loïc Reynier. Transition et turbulence des écoulements incompressibles à densité variable. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Claude Bernard - Lyon I, 2023. Français. NNT : 2023LYO10320 . tel-04496592v2

**HAL Id: tel-04496592**

**<https://hal.science/tel-04496592v2>**

Submitted on 30 Oct 2024

**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.

# THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE CLAUDE BERNARD LYON 1

Ecole Doctorale N° 162  
Mécanique Energétique Génie Civil Acoustique (MEGA)

**Discipline** : Mécanique des fluides

Soutenue publiquement le 11/12/2023, par :  
**Loïc Reynier**

---

## Transition et turbulence dans les écoulements incompressibles à densité variable

---

Devant le jury composé de :

Nore, Caroline	Professeure des Universités - Université Paris Saclay	Présidente
Anselmet, Fabien	Professeur des Universités - Ecole Centrale Marseille	Rapporteur
Cinnella, Paola	Professeure des Universités - Sorbonne Université Paris	Rapporteure
Vinkovic, Ivana	Professeure des Universités - Université Lyon 1	Examinatrice
Alizard, Frédéric	Maître de Conférences, HDR - Université Lyon 1	Directeur de thèse
Di Pierro, Bastien	Maître de Conférences - Université Lyon 1	Co-directeur de thèse
Creyssels, Mathieu	Maître de Conférences - Ecole Centrale Lyon	Invité



« Plutôt dans le sens du courant  
de la rivière »

---

— *Perceval de Galles.*





## Résumé

Ce travail s'intéresse à la dynamique turbulente d'un écoulement incompressible caractérisé par d'importantes variations de masse volumique, représentatif d'un rejet atmosphérique à basse vitesse. Ces écoulements sont au cœur des préoccupations du 21e siècle et leur dynamique à densité variable, qui ne peut être correctement décrite par une approximation de type Boussinesq, demeure peu explorée.

L'objectif principal de cette étude est d'analyser le comportement d'une turbulence isotrope en interaction avec un champ de densité inhomogène au sein d'un processus de mélange. Pour ce faire, l'étude emploie une formulation où le champ de densité est traité comme un scalaire actif de l'écoulement incompressible. La complexité du problème a nécessité le développement d'une méthode numérique de précision spectrale, notamment en utilisant une technique de préconditionnement originale pour assurer une intégration en temps d'ordre deux des équations discrètes.

Dans ce contexte, des analyses statistiques et spectrales des données obtenues à partir de simulations numériques directes de turbulence isotrope à densité variable sont réalisées. L'objectif est de déterminer si l'introduction d'un champ de densité inhomogène a un impact sur le comportement observé dans le cas de la turbulence isotrope à densité constante.

Les résultats de cette étude mettent en évidence que l'introduction d'un champ de densité inhomogène dans une turbulence isotrope induit des modifications significatives des caractéristiques du champ de vitesse. Plus précisément, cette interaction conduit à la génération de structures de plus petites échelles au sein de l'écoulement. De plus, un pic d'énergie est observé dans les plus petites échelles du spectre d'énergie, attribué à une dynamique d'instabilité Rayleigh–Taylor.

## Abstract

This study focuses on the turbulent dynamics of an incompressible flow characterized by significant variations in density, representative of a low-speed atmospheric emission. Such flows are at the forefront of 21st-century concerns, and their density-variable dynamics, which cannot be accurately described by a Boussinesq-type approximation, remains largely unexplored.

The primary objective of this investigation is to analyze the behavior of isotropic turbulence interacting with an inhomogeneous density field within a mixing process. To achieve this, the study employs a formulation in which the density field is treated as an active scalar in the incompressible flow. The complexity of the problem necessitated the development of a high-precision spectral numerical method, including the use of an original preconditioning technique to ensure second-order time integration of the discrete equations.

In this context, statistical and spectral analyses of data obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence with variable density are conducted. The goal is to determine whether the introduction of an inhomogeneous density field has an impact on the behavior observed in the case of isotropic turbulence with constant density.

The results of this study highlight that the introduction of an inhomogeneous density field into isotropic turbulence induces significant modifications in the characteristics of the velocity field. Specifically, this interaction leads to the generation of smaller-scale structures within the flow. Furthermore, an energy peak is observed in the smallest scales of the energy spectrum, attributed to Rayleigh–Taylor instability dynamics.

## Avant-propos

Cette thèse a été menée au département de mécanique de l'Université Claude Bernard Lyon1, au sein de l'équipe Turbulence & Instabilité du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (LMFA), sous la direction de Frédéric Alizard et l'encadrement de Bastien Di Pierro. Je tiens à exprimer toute ma gratitude et ma reconnaissance envers Frédéric et Bastien pour la qualité de leur encadrement. Ils ont toujours été présents pendant ces trois ans, tant sur le plan professionnel que sur le plan humain.

Je tiens également à remercier Thouraya Baranger et Mathieu Creyssels pour leur accompagnement lors des comités de suivi de thèse.

Enfin, je souhaite exprimer mes remerciements envers Paola Cinnella, professeure à Sorbonne Université, et Fabien Anselmet, professeur à l'École Centrale Marseille, qui me font l'honneur de rapporter ce travail.

# Table des matières

Table des matières	vi
Table des figures	viii
Liste des symboles	x
Introduction	1
<b>1 Théorie</b>	<b>4</b>
1.1 Hypothèses de modélisation	5
1.2 Formulation mathématique	10
1.3 Turbulence Homogène Isotrope	14
<b>2 Méthodes numériques</b>	<b>21</b>
2.1 Simulation numérique directe	22
2.2 Schémas d'avancement temporel	25
2.3 Préconditionnement des opérateurs à densité variable	32
2.4 Validation	40
2.5 Simulations et post-traitement	44
<b>3 Turbulence isotrope à densité variable</b>	<b>47</b>
3.1 Méthode de forçage	50
3.2 Méthodologie d'étude statistique	52
3.3 Analyse temporelle	58
3.4 Analyse statistique	64
3.5 Analyse spectrale	72
3.6 Conclusions	82
<b>4 Jet transitionnant vers la THI à densité variable</b>	<b>85</b>
4.1 Modélisation du jet	85
4.2 Évolution temporelle du jet	87
4.3 Spectres d'énergie	88
4.4 Conclusions et perspectives	91
<b>5 Conclusions et perspectives</b>	<b>94</b>
5.1 Méthodes numériques	95
5.2 Turbulence Homogène Isotrope	95
5.3 Jet à densité variable	96
5.4 Perspectives	96
<b>A Stockage des données</b>	<b>98</b>
A.1 D'une interface personnalisée à HDF5	99

A.2	Avantages et limites du format de fichier HDF5 . . . . .	99
A.3	Structures des données . . . . .	100
<b>B</b>	<b>Méthodes Runge–Kutta</b>	<b>102</b>
B.1	Méthodes explicites . . . . .	102
B.2	Méthodes implicites . . . . .	103
<b>C</b>	<b>Visualisations de THI à densité variable</b>	<b>104</b>
C.1	Évolution du champ de densité . . . . .	104
C.2	Évolution de la vorticité . . . . .	104
<b>D</b>	<b>Calcul du degré d’isotropie</b>	<b>114</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>115</b>
	<b>Liste des abbréviations</b>	<b>121</b>
	<b>Glossaire</b>	<b>123</b>

# Table des figures

0.1	Illustration de la structure d'un jet à densité variable . . . . .	3
1.1	Illustration de l'intégration dans l'espace spectral du spectre d'énergie de la THI . . . . .	18
1.2	Illustration de la cascade du spectre d'énergie de la THI . . . . .	19
2.1	Illustration de la décomposition du domaine de calcul du code POUSSINS . . . . .	23
2.2	Courbes d'erreurs temporelles des schémas Runge–Kutta lors de simulations à densité constante	33
2.3	Courbes d'erreurs temporelles des schémas Runge–Kutta lors de simulations à densité variable	34
2.4	Évolution du conditionnement des opérateurs de diffusion en fonction des paramètres de simulation pour des cas test 1D . . . . .	37
2.5	Historiques de convergence des solveurs itératifs pour l'opérateur de diffusion pour des cas tests 1D . . . . .	38
2.6	Évolution du conditionnement des opérateurs de pression en fonction des paramètres de simulation pour des cas tests 1D . . . . .	40
2.7	Historiques de convergence des solveurs itératifs pour l'opérateur de pression pour des cas tests 1D . . . . .	40
2.8	Évolution des isocontours de densité lors de DNS de Rayleigh–Taylor Instability . . . . .	43
2.9	Évolution de la norme de la perturbation de la vitesse axiale durant une DNS de jet tourbillonnant à densité variable . . . . .	43
2.10	Courbe d'accélération du code DNS POUSSINS . . . . .	44
3.1	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-4 . . . . .	55
3.2	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.5 . . . . .	56
3.3	Évolution de quantités caractéristiques de la turbulence lors de la DNS de THI à densité variable 256-4 . . . . .	57
3.4	Évolution de l'énergie cinétique intégrée lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	59
3.5	Évolution du coefficient de forçage de Lundgren lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	59
3.6	Évolution des contributions des termes du coefficient de forçage lors de la DNS de THI à densité variable 256-8 . . . . .	60
3.7	Évolution du nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	60
3.8	Illustration du coefficient de skewness d'une distribution . . . . .	61
3.9	Illustration du coefficient de flatness d'une distribution . . . . .	62
3.10	Évolution de la PDF du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	63
3.11	Évolution des moments du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	64
3.12	Évolution de la PDF de la dérivée longitudinale du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	65
3.13	Évolution de la PDF de la dérivée transverse du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable . . . . .	66
3.14	PDF du champ de vitesse moyennées sur l'intervalle d'étude des simulations de THI à densité variable. . . . .	68

3.15	PDF normalisées du champ de vitesse moyennées sur l'intervalle d'étude des simulations de THI à densité variable. . . . .	69
3.16	Tracé des isosurfaces de la norme de la vorticité de la condition initiale à densité constante et de la DNS de THI à densité variable 256-4 . . . . .	73
3.17	Tracé des isosurfaces de la norme de la vorticité des DNS de THI à densité variable 256-0.5 et 256-8 . . . . .	74
3.18	Spectres d'énergie des DNS de THI à densité variable . . . . .	76
3.19	Spectres d'énergie et échelles de longueur des DNS de THI à densité variable . . . . .	77
3.20	Tracé des isosurfaces du critère de RTI de la DNS de THI 256-4 . . . . .	78
3.21	Densités spectrales d'énergie du critère de RTI des DNS de THI à densité variable . . . . .	79
3.22	Illustration de la stabilité Rayleigh–Taylor des tourbillons . . . . .	82
3.23	Illustration du modèle de prédiction du spectre d'énergie de THI à densité variable . . . . .	83
4.1	Évolution du champ de densité lors de la DNS de jet temporel à densité variable J256-2 . . . . .	88
4.2	Évolution du champ de densité lors de la DNS de jet temporel à densité variable J256-6 . . . . .	89
4.3	Évolution de quantités caractéristiques de la turbulence de jet lors de la DNS de jet temporel à densité variable J256-6 . . . . .	90
4.4	Évolution du spectre d'énergie lors des DNS de jet à densité . . . . .	91
4.5	Évolution de la pente du spectre d'énergie lors de la DNS de jet à densité variable J256-6 . . . . .	92
4.6	Densités spectrales du critère RTI lors de l'éclatement tourbillonnaire des DNS de jet à densité variable . . . . .	93
A.1	Illustration de la structure d'un fichier de stockage de données . . . . .	101
C.1	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.25 . . . . .	105
C.2	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-2 . . . . .	106
C.3	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-6 . . . . .	107
C.4	Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-8 . . . . .	108
C.5	Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.25 . . . . .	109
C.6	Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.5 . . . . .	110
C.7	Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-4 . . . . .	111
C.8	Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-6 . . . . .	112
C.9	Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-8 . . . . .	113

# Liste des symboles

## Grandeurs descriptives de l'écoulement

$w$	vitesse moyennée par la masse, défini dans l'équation (1.10) page 8
$u$	vitesse moyennée par le volume, défini dans l'équation (1.12) page 8
$Re$	nombre de Reynolds, défini l'équation (1.25) page 12
$Sc$	nombre de Schmidt, défini l'équation (1.26) page 12
$\rho$	champ de densité
$p$	champ de pression
$\varphi$	champ quelconque de l'écoulement
$D$	coefficient de diffusion de masse
$G^2$	critère d'instabilité Rayleigh–Taylor, défini dans l'équation (3.24) page 80
$\bar{e}$	énergie cinétique par unité de masse $\frac{1}{2}v^2$
$e$	énergie cinétique par unité de volume $\frac{1}{2}\rho v^2$
$Fr$	nombre de Froude
$Pe$	nombre de Péclet
$\delta t$	pas d'avancement temporel
$s$	rapport de densité entre les deux composants du fluide
$\varsigma$	taux de croissance d'une instabilité
$\varepsilon$	taux de transfert/diffusion d'énergie
$T_\Omega$	temps d'éclatement tourbillonnaire du jet
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes
$\mathbf{r}$	vecteur position
$\mathbf{v}$	vitesse d'un écoulement à densité constante

## Grandeurs associées à la résolution numérique

$\phi$	champ de pression calculé pour la projection du champ de vitesse, défini dans l'équation (2.6) page 24
$\mathbf{u}^*$	champ de vitesse intermédiaire à divergence non nulle, défini dans l'équation (2.7) page 24
$\Phi$	changement de variable de pression défini par $\Phi = \phi/\sqrt{\rho}$
$\kappa$	conditionnement
$\epsilon$	erreur numérique
$N$	nombre de points de discrétisation selon une direction

## Opérateurs

$D_\pm$	opérateur de diffusion de masse semi-implicite, défini dans l'équation (2.24) page 30
$\mathbf{P}$	opérateur de projection à densité constante, défini dans l'équation (2.5) page 24
$\mathbf{P}_\rho$	opérateur de projection à densité variable, défini dans l'équation (2.8) page 24
$\mathbf{V}_{\rho\pm}$	opérateur de diffusion semi-implicite, défini dans l'équation (2.23) page 30
$\mathbf{K}_\rho$	opérateur de pression à densité variable avec changement de variable $\Phi = \phi/\sqrt{\rho}$ , défini dans l'équation (2.33) page 36



$L_\rho$	opérateur de pression à densité variable, défini dans l'équation (2.6) page 24
$\nabla \cdot$	opérateur divergence
$\nabla$	opérateur gradient
$\nabla^2$	opérateur Laplacien

### Quantités spectrales

DSE	Densité Spectrale d'Énergie
$k$	mode de Fourier
$\mathcal{F}$	transformée de Fourier
$\hat{\cdot}$	transformée de Fourier

### Quantités statistiques

$F$	coefficient de flatness de $\partial u_x / \partial x$ , défini dans l'équation (3.16) page 70
$S$	coefficient de skewness de $\partial u_x / \partial x$ , défini dans l'équation (3.15) page 70
$\sigma$	écart type
PDF	Probability Density Function

### Quantités descriptives de la turbulence

$L$	échelle intégrale, définie dans l'équation (1.44a) page 18
$\lambda$	échelle de Taylor, définie dans l'équation (1.44b) page 19
$Re_\lambda$	nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor, défini dans l'équation (1.47) page 20
$T$	temps de retournement, défini dans l'équation (1.48) page 20
$q$	coefficient de forçage, défini dans l'équation (3.4) page 51 dans le cas à densité constante et dans l'équation (3.7) page 51 dans le cas à densité variable
$E$	spectre d'énergie cinétique turbulente (par unité de masse), détaillé dans la section 1.3.2

# Introduction

La mécanique des fluides, en tant que domaine fondamental de la physique, offre une perspective d'analyse et de compréhension essentielle des phénomènes naturels et industriels. L'étude de ces mécanismes constitue un champ d'investigation inépuisable, révélant une diversité infinie de comportements, tantôt délicatement laminaires, tantôt prodigieusement turbulents. La complexité inhérente aux phénomènes fluides requiert une approche différente pour chaque configuration d'écoulement, s'appuyant sur des méthodologies spécifiques.

Parmi ces différentes configurations, les écoulements de type rejets atmosphériques, tels que ceux émis par les cheminées industrielles ou les phénomènes naturels sont au cœur des préoccupations du 21e siècle. En effet, les derniers rapports du Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat (GIEC), résumés par PACHAURI et al. [61], révèlent que près de la moitié des émissions de Gaz à Effet de Serre (GES), accumulées entre 1750 et 2010, se sont concentrées sur une période de seulement 40 ans, de 1970 à 2010 [61, topic 1]. Cette accélération spectaculaire soulève des préoccupations cruciales quant à ses conséquences sur le climat et les biodiversités de notre planète. Les secteurs énergétiques et industriels émergent comme les principaux contributeurs, à hauteur de 50% des émissions totales de GES.

Ces émissions se matérialisent principalement sous forme de rejets atmosphériques, accentuant ainsi le défi de contrôler et de réduire leur impact sur l'environnement. Ces écoulements ouverts, souvent caractérisés par leur nature turbulente et dispersive, sont marqués par d'importants gradients de densité entre le gaz rejeté et l'atmosphère environnante. Cette combinaison de facteurs donne lieu à des comportements complexes et difficiles à appréhender. Une connaissance approfondie de leur dynamique turbulente à toutes les échelles s'avère donc indispensable pour amorcer une prédiction éclairée de leur comportement global et leurs éventuelles répercussions sur l'environnement et la santé publique.

Le comportement instable et turbulent des écoulements de fluides homogènes a été largement étudié, en particulier dans le cadre de configurations d'écoulements libres isotropes [49, 75, 41, 24]. En revanche, lorsque des effets de variation de masse sont pris en compte, cela entraîne l'émergence de nouvelles instabilités. Ces dernières peuvent ainsi entraîner des modifications significatives dans le chemin vers la turbulence ainsi que dans la dynamique même de la turbulence. En effet, il est prévisible que les structures dissipatives associées peuvent subir des altérations importantes, ce qui se traduit par une dissipation d'énergie à des échelles temporelles et spatiales différentes par rapport à un écoulement avec un champ de densité uniforme. Parmi ces instabilités, la Rayleigh–Taylor Instability (RTI, *Instabilité de Rayleigh–Taylor*) est anticipée comme un phénomène émergent dans ces écoulements. Cette instabilité fondamentale survient à l'interface entre deux fluides présentant des densités différentes, lorsque le fluide le plus dense est accéléré en direction du fluide moins dense. Au sein d'un écoulement turbulent qui mélange deux gaz de densités différentes, cette configuration peut se manifester à diverses échelles.

La compréhension des mécanismes à l'œuvre lors de l'introduction d'une forte variation de masse est un domaine de recherche plus récent. Les travaux de RAVIER et al. [66], FONTANE [26], DI PIERRO [20], LOPEZ-ZAZUETA [54] et JACQUES [42], entre autres, ont contribué à la compréhension de ces instabilités. Plus spécifiquement, RAVIER et al. [66] se penchent sur les jets incompressibles libres. L'étude révèle que ces écoulements, caractérisés par deux modes distincts, à savoir les modes sinueux et variqueux, présentent des dynamiques instables différentes dans les configurations à densité constante et à densité variable. Dans le cas à densité constante, le mode sinueux prédomine, tandis que le mode variqueux

prend le dessus dans une configuration à densité variable et subit une transition convective/absolue.

Les recherches menées par FONTANE [26] se concentrent sur les écoulements cisailés incompressibles non pesants à densité variable. Les résultats de ses travaux démontrent que les inhomogénéités de masse entraînent une modification de la dynamique rotationnelle locale, influencée par l'action du couple barocline qui agit comme un terme source/puits de vorticit . Ces ph nomenes se traduisent notamment par une transition particuli re vers la turbulence.

DI PIERRO [20] se consacre   l' tude de la dynamique des jets tournants   densit  variable. Ses travaux mettent en  vidence que la dynamique instable d coule de la comp tition entre un mode de Couette–Taylor, un mode de Rayleigh–Taylor, ainsi qu'un troisi me mode tridimensionnel induit par un couplage de vitesse au sein de l' coulement. L'interaction entre la turbulence et les m canismes r v l s par ces travaux constitue une probl matique nouvelle et encore peu explor e.

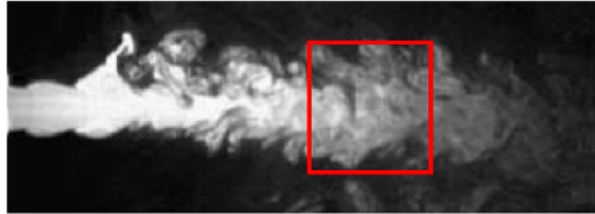
Dans cette perspective, des travaux pionniers men s par l' quipe de LIVESCU [51, 52, 53] se concentrent sur l'exploration des propri t s de la turbulence   densit  variable entra n es par des effets de flottaison. Ces travaux ont abouti   la cr ation d'une base de donn es qui a  t  ult rieurement utilis e par des auteurs tels que RAO, CAULFIELD et GIBBON [65]. Ces  tudes ax es sur les propri t s du m lange r v lent que les ph nomenes   densit  variable avec forts gradients de masse ne peuvent pas  tre captur s avec une mod lisation de type Boussinesq. L'approximation de Boussinesq, pour pr ciser, est une simplification qui suppose que les variations de densit  dans l' coulement sont faibles, et qui traite le champ de densit  comme un scalaire passif, ce qui n'est pas le cas dans ces situations. En effet, des comportements distincts sont observ s par rapport   des configurations   faibles gradients de densit . Dans ce contexte, la turbulence d velopp e n'est pas entra n e par un m canisme externe, mais r sulte plut t de la conversion de l' nergie potentielle disponible dans le champ de densit  initial. De plus, le fluide l ger se m lange plus rapidement que le fluide plus dense, ce qui engendre un m lange asym trique et des Probability Density Function (PDF, *Fonction de Densit  de Probabilit *) du champ de densit  non sym triques. En outre, dans cette configuration, les moments d'ordre  lev s du champ de densit  sont mesur s comme croissants au cours du temps, ce qui conduit   un m lange d'un scalaire plus efficace qu'avec une turbulence   densit  constante [65].

NOMURA et ELGHOBASHI [58] s'int ressent   la dynamique turbulente dans une configuration de flammes non pr m lang es   densit  variable. Cette recherche met en  vidence que l'alignement des tourbillons au sein de l' coulement turbulent subit des modifications en raison de la lib ration exothermique d' nergie, r sultant du transport d'un scalaire r actif actif. Ces observations sugg rent ainsi que la dynamique est alt r e par des effets li s   la densit  variable.

MOHAGHAR et al. [56] se penchent sur les interactions entre la turbulence isotrope d velopp e par des ondes de choc   densit  variable (instabilit  de Richtmyer–Meshkov), et se concentre particuli rement sur l' volution des spectres d' nergie apr s des chocs r p t s. Par ailleurs, TIAN, JABERI et LIVESCU [78] examinent les effets de la densit  sur la structure et la dynamique de la turbulence post-choc. Notamment ils mesurent des effets de densit  sur l'asym trie du tenseur des gradients de vitesse.

Malgr  les avanc es significatives  nonc es ci-dessus, notre compr hension des structures aux petites  chelles de la turbulence   densit  variable demeure incompl te. Les travaux bas s sur les simulations r alis es par l' quipe de LIVESCU contribuent   une meilleure compr hension des transferts d' nergie qui donnent lieu   une turbulence entra n e par des effets de flottabilit  et de RTI. Leurs r sultats d taillent  galement l' volution du champ de densit  lors du processus de m lange, ainsi que l'efficacit  de ce dernier. Cependant, la compr hension de l'interaction entre les champs turbulents et les effets de densit  demeure largement inexplor e, en particulier en ce qui concerne la dynamique   l' chelle des plus petites structures. Les  tudes pr c demment cit es, men es par NOMURA et ELGHOBASHI [58], MOHAGHAR et al. [56] et TIAN, JABERI et LIVESCU [78], se concentrent sur les effets de densit  sur la structure du champ de vitesse et le spectre d' nergie. Toutefois, il convient de noter que leurs  tudes sont men es dans des configurations complexes, telles que des flammes r actives ou la turbulence post-choc, ce qui complique l'isolement des effets directement li s   l'interaction avec le champ de densit  inhomog ne.

L'objet de cette th se consiste en une  tude fondamentale de l'interaction entre une turbulence en milieu ouvert pleinement d velopp e et un champ de densit  inhomog ne. Le comportement turbulent d'un rejet atmosph rique, dans une r gion  loign e de sa zone d'injection, est mod lis  avec une Turbu-



**Figure 0.1** : Illustration de la structure d'un jet d'hélium expérimental (à densité variable) à  $Re = 976$ . L'encadré rouge révèle la zone de turbulence isotrope dans la dynamique du jet, éloignée de la zone d'éjection. Les mesures ont été réalisées par BOUJEMAA, AMIELH et CHAUVE [7].

lence Homogène Isotrope (THI) sous une formulation incompressible en tenant compte des variations de densité. Dans cette optique, une approche similaire à celle préalablement employée par LIVESCU et RISTORCELLI [51], DI PIERRO [20] et JACQUES [42] est adoptée : *la masse volumique est considérée comme un scalaire actif de l'écoulement et est résolue au moyen d'une équation de convection/diffusion*.

L'emploi d'une modélisation THI est idéale pour des études fondamentales sur la turbulence. Néanmoins, cette approche s'avère également pertinente pour des configurations plus réalistes de rejets atmosphériques. Ces écoulements exhibent une dynamique pleinement turbulente et à caractère isotrope dès qu'on s'éloigne de la zone d'éjection. Ce comportement peut être observé dans la figure 0.1, représentant un jet d'hélium à densité variable à  $Re = 976$  [7]. Par conséquent, cette approche s'avère capable de saisir la dynamique des structures turbulentes dans le cadre d'un rejet atmosphérique.

L'objectif principal est d'étudier si l'introduction d'un champ de densité inhomogène au sein d'une turbulence isotrope entraîne des modifications dans le comportement aux petites échelles décrit par les lois à densité constante. L'étude se base sur des Direct Numerical Simulation (DNS, *Simulation Numérique Directe*) implémentées à l'aide d'un solveur approprié. La turbulence est ainsi examinée à travers une analyse statistique des champs de vitesse et de densité.

Ce manuscrit s'organise autour de cinq chapitres. Le premier introduit le cadre théorique utilisé tout au long de cette étude. Il aborde en particulier le développement des équations de la THI à densité variable ainsi que du système mathématique employé pour la modélisation du mélange du rejet atmosphérique. Une attention particulière est portée aux hypothèses fondamentales qui conduisent à l'élaboration du modèle.

Le second chapitre présente les méthodes numériques mises en œuvre pour réaliser des DNS de jet turbulent et de THI à densité variable. Il expose la méthode de projection utilisée pour le calcul de la pression dans le système incompressible, le choix de la méthode d'intégration pour l'avancement en temps des équations discrètes, ainsi que la technique de préconditionnement employée pour la projection et le traitement semi-implicite des équations. Le modèle numérique est ensuite validé par intégration d'une solution pseudo-exacte et simulation de cas représentatifs, à savoir la RTI 2D et le jet tourbillonnant à densité variable.

Le chapitre 3 constitue le cœur de cette thèse, et se concentre sur l'analyse de l'interaction entre une turbulence isotrope et un champ de densité inhomogène. Il décrit la méthodologie employée pour la réalisation et l'analyse des DNS de THI à densité variable. Une analyse statistique et spectrale des structures de l'écoulement ainsi que les effets liés à densité variable est proposée, mettant en évidence les différences observées par rapport à une THI à densité constante.

Le quatrième chapitre présente une étude d'un jet à densité variable en transition vers une turbulence isotrope. Cette étude complémentaire vise à vérifier si les caractéristiques observées avec la modélisation THI, sont également capturées avec une DNS de jet. Elle permet notamment de valider l'emploi d'une modélisation de turbulence isotrope pour l'étude d'un rejet atmosphérique. Pour ce faire, une méthodologie similaire d'analyse statistique et spectrale est employée pour étudier la structure de l'écoulement.

En conclusion, le dernier chapitre offre une synthèse des travaux réalisés et des résultats obtenus au cours de cette étude. Il aborde également les perspectives de recherches qui méritent d'être explorées dans la continuité de ce travail.

# Chapitre 1

## Théorie

### Table des matières

---

1.1	Hypothèses de modélisation . . . . .	5
1.1.1	Écoulement non réactif et isotherme . . . . .	5
1.1.2	Diffusion moléculaire et fluide newtonien . . . . .	7
1.1.3	Écoulement incompressible . . . . .	7
1.1.4	Écoulement turbulent libre et isotrope . . . . .	9
1.1.5	Conclusion sur les hypothèses . . . . .	10
1.2	Formulation mathématique . . . . .	10
1.2.1	Équations du mouvement . . . . .	10
1.2.2	Équations adimensionnées . . . . .	12
1.2.3	Solution pseudo-exacte . . . . .	13
1.2.4	Conclusion sur la formulation mathématique . . . . .	14
1.3	Turbulence Homogène Isotrope . . . . .	14
1.3.1	Équations de la turbulence isotrope . . . . .	15
1.3.2	Spectre d'énergie . . . . .	16
1.3.3	Échelles spatiales de la turbulence . . . . .	18

---

L'objectif de ce chapitre est d'introduire le cadre théorique qui a été utilisé tout au long de ce travail. La section 1.1 présente en détail les hypothèses retenues pour modéliser un écoulement de type rejet atmosphérique. La combinaison des hypothèses conduit à l'établissement d'un modèle de Kazhikhov–Smagulov [48] pour décrire la dynamique de l'écoulement à densité variable. En quelques mots, ce modèle est une généralisation des équations de Navier–Stokes incompressibles au cas à densité variable avec diffusion de masse suivant la loi de Fick. Le champ de densité est alors traité comme un scalaire actif de l'écoulement et une équation supplémentaire est introduite pour régir son évolution. Ce modèle est associé à un modèle de THI forcée pour les phénomènes turbulents. La formulation mathématique du modèle est développée dans la section 1.2 jusqu'à l'obtention du système d'équations adimensionnées résolu par le solveur DNS. Enfin, la section 1.3 présente les principes de la modélisation turbulente THI.

## 1.1 Hypothèses de modélisation

L'objectif de cette section réside dans l'établissement des hypothèses de travail nécessaires à la construction d'un modèle mathématique permettant de modéliser un écoulement de type rejet atmosphérique. Comme c'est le cas pour toute modélisation, les simplifications adoptées ne sont valables qu'à une échelle spécifique et peuvent induire des erreurs dans la représentation physique. Néanmoins, ces simplifications sont indispensables pour rendre le problème suffisamment accessible à une description mathématique et, d'autre part, pour sélectionner une dynamique appropriée. À cette fin, il est nécessaire de recenser les caractéristiques propres à ces écoulements :

- **Mélange de deux gaz** : Les rejets atmosphériques industriels déversent des gaz polluants dans l'atmosphère tandis que les panaches de volcans sont principalement composés de vapeur d'eau (à hauteur de 80%). Leur interaction avec l'atmosphère donne donc lieu à un mélange binaire gazeux polluant-air ou vapeur d'eau-air.
- **Écoulement à densité variable** : Les mélanges gazeux cités précédemment se distinguent par des variations importantes de masse. Ces fluctuations résultent principalement du mélange de deux gaz ayant des densités différentes. Par exemple, le rapport de densité du mélange SF<sub>6</sub>-air est de 6 et le rapport CO<sub>2</sub>-air est de 2.
- **Écoulement basse vitesse** : Ces écoulements d'émissions se caractérisent par des vitesses de l'ordre de la dizaine de mètres par seconde. Ces valeurs sont donc significativement inférieures à la vitesse du son dans l'atmosphère estimée à environ 340 m s<sup>-1</sup>, et qui ne varie peu avec l'altitude. Ainsi, de tels écoulements n'exhibent pas de caractère compressible.
- **Turbulence isotrope** : Loin de la zone d'éjection, l'écoulement présente toujours un caractère turbulent sans direction préférentielle. Cette propriété peut être observée dans des phénomènes tels que les panaches de volcan en éruption et les cheminées de centrales électriques. En effet, à une certaine distance de la région d'émission, les nuages résultants acquièrent un comportement quasiment isotrope.

En prenant en considération ces caractéristiques, les sous-sections suivantes détaillent les hypothèses mises en place pour modéliser ces écoulements.

### 1.1.1 Écoulement non réactif et isotherme

Une première simplification envisageable consiste à restreindre le modèle en éliminant les phénomènes qui ne semblent pas pertinents pour l'objectif de l'étude. Dans ce contexte, l'intérêt se porte sur l'interaction fondamentale entre la turbulence et un champ de densité inhomogène lors d'un processus de mélange. Par conséquent, les effets chimiques réactifs, qui pourraient introduire des complexités supplémentaires, ne semblent pas pertinents pour la modélisation. *Un écoulement non réactif est donc considéré pour cette modélisation.*

Toutefois, il convient de noter que l'omission des effets chimiques réactifs pourrait avoir une incidence sur certains scénarios spécifiques d'émissions atmosphériques, notamment dans des conditions de combustions ou de réactions chimiques complexes. Dans ce cas, une étude détaillée des interactions chimiques serait justifiée. Néanmoins, dans le cadre de notre étude focalisée sur l'aspect fondamental de l'interaction turbulence-densité sans considérer d'espèce chimique particulière, l'élimination des effets chimiques réactifs apparaît comme une simplification judicieuse. Cette approche permet de concentrer les efforts sur l'analyse des mécanismes turbulents. L'élimination des effets chimiques permet de réduire le nombre de variables prises en compte dans les équations. Par exemple, le potentiel chimique ne figure plus dans l'équation de conservation de la masse du mélange.

De plus, il est important de noter que dans de nombreux cas d'écoulements non réactifs, la température est considérée comme un scalaire passif transporté par l'écoulement. Par conséquent se pose la question de savoir s'il est nécessaire de prendre en compte les variations de températures dans la

modélisation. GLAZE et BALOGA [31] montrent que dans le cas d'un panache volcanique, la température se stabilise avec l'altitude et converge rapidement vers la température atmosphérique. Étant donné que l'intérêt se porte sur une région suffisamment éloignée de la zone d'éjection, il est raisonnable de supposer que la température ne varie que très peu. *Un écoulement isotherme est donc considéré.* Cette approximation repose sur l'idée que les variations de température dans cette région éloignée de la zone d'éjection sont négligeables par rapport aux phénomènes d'interactions entre la turbulence et la diffusion de masse. Ceci est confirmé par les faibles valeurs du coefficient de dilatation des gaz de l'ordre de  $10^{-3} \text{ K}^{-1}$  [42].

Désormais, la température étant supposée comme constante, cette information peut être exploitée pour davantage simplifier le modèle. Malgré le fait que les gaz présents dans l'écoulement de mélange ne soient pas en état d'équilibre, il est envisageable d'utiliser la loi des gaz parfaits comme première approximation pour définir le comportement des paramètres de diffusion. La viscosité dynamique d'un gaz parfait est donnée par la loi de Sutherland [76]

$$\mu(T) = \mu^0 \left( \frac{T^0 + C}{T + C} \right) \left( \frac{T}{T^0} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (1.1)$$

où  $\mu(T)$  désigne la viscosité dynamique à la température  $T$ ,  $\mu^0$  la viscosité à  $T^0 = 273.15 \text{ K}$  et  $C$  la constante de Sutherland définie par  $C = 1.47 T_{\text{eb}}$  avec  $T_{\text{eb}}$  la température d'ébullition du gaz. Dans le cas d'un mélange binaire, la formule semi-empirique proposée par WILKE [80]

$$\mu(T) = \frac{\mu_A(T)}{1 + \frac{1-c_A}{c_A} f_{AB}} + \frac{\mu_B(T)}{1 + \frac{c_A f_{BA}}{1-c_A}}, \quad (1.2a)$$

avec

$$f_{AB} = \frac{\left( 1 + \left( \frac{\mu_A^0}{\mu_B^0} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{M_A}{M_B} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2}{2\sqrt{2} \left( 1 + \frac{M_A}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.2b)$$

est utilisée. Ici,  $M_A$  et  $c_A$  représentent respectivement la masse molaire et la concentration volumique de l'espèce A. La viscosité dynamique du mélange dépend donc uniquement de la température, supposée constante. Par ailleurs, FONTANE [26, section A.4] démontre que dans le cas d'un mélange binaire, la viscosité dynamique reste constante en fonction du rapport de densité, contrairement à la viscosité cinématique. Par conséquent, il n'est pas nécessaire de faire évoluer ce coefficient en fonction du taux de diffusion lors d'une simulation. Ainsi, la viscosité dynamique peut-être approximée par une constante, ce qui permet de simplifier la modélisation.

La diffusivité massique d'un gaz parfait A dans un gaz B est donnée d'après la théorie de Chapman-Enskog par

$$D_{AB} = 0.0018583 \frac{\sqrt{T^3 \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_{D,AB}}, \quad (1.3)$$

où  $M_A$  et  $M_B$  désignent les masses molaires des gaz et  $\sigma_{AB}^2$ ,  $\Omega_{D,AB}$  sont des paramètres déterminés de manière empirique. Pour plus d'information, voir les ouvrages de BIRD, STEWARD et LIGHTFOOT [6, section 17.3] et CUSSLER [19, section 5.1]. Tout comme la viscosité, le coefficient de diffusion de masse du mélange est principalement fonction de la température. Ainsi, il est raisonnable de la considérer comme constante. En outre, selon CUSSLER [19, section 5.1], pour les gaz (notamment pour des mélanges tels qu'air-CO<sub>2</sub>), les coefficients de diffusion  $D_{AB}$  et  $D_{BA}$  sont suffisamment proches pour être considérés comme égaux.

En résumé, l'hypothèse d'un *écoulement non réactif et isotherme* permet de mettre de côté les effets chimiques réactifs ici non pertinents, de ne pas avoir à traiter l'équation d'évolution de la température et de travailler avec des coefficients de diffusion constants. L'utilisation de coefficients constants facilite par la suite l'établissement de paramètres de contrôle sans dimension, tel que le nombre de Reynolds et le nombre de Schmidt.

### 1.1.2 Diffusion moléculaire et fluide newtonien

Après avoir exclu les phénomènes chimiques réactifs, il est nécessaire de modéliser les effets de diffusions qui entraînent l'interaction entre la turbulence et les variations de masse dans l'écoulement de mélange. La loi de Fick détaillée par TAYLOR et KRISHNA [77, chapitre 3], modélise la diffusion moléculaire d'une espèce  $k$  dans les  $N - 1$  autres espèces du mélange à travers le flux

$$\mathbf{J}_k(\mathbf{r}, t) = -\rho(\mathbf{r}, t) \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N D_{ki} \nabla w_k(\mathbf{r}, t), \quad (1.4)$$

où  $\rho(\mathbf{r}, t)$  est le champ de densité global du mélange et  $w_k(\mathbf{r}, t) = m_k(\mathbf{r}, t)/M$  est la fraction massique locale de l'espèce  $k$  par rapport à la masse totale du mélange  $M$ . Ces deux quantités sont des fonctions de la position spatiale  $\mathbf{r}$  et du temps  $t$ .

Cette approche utilisée pour modéliser les variations de masse sans phénomènes compressibles est avantageuse puisqu'elle génère des variations de densité suffisamment régulières pour être projetées sur une base spectrale. Cette propriété essentielle permet d'appliquer des méthodes spectrales pour la discrétisation spatiale, contribuant ainsi à une résolution numérique précise et efficace des équations du problème.

En ce qui concerne la diffusion visqueuse de quantité de mouvement, l'hypothèse isotherme a déjà permis d'utiliser un coefficient de viscosité dynamique constant. L'utilisation d'un modèle non newtonien pour décrire la description des phénomènes visqueux entraînerait des complications et des interactions supplémentaires à l'interaction fondamentale entre la turbulence et les effets de diffusion de masse. Ainsi, *un modèle de fluide newtonien est considéré* dans lequel le tenseur des contraintes  $\boldsymbol{\tau}$  est donné par

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^\top) + \mu' (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I}, \quad (1.5)$$

où  $\mathbf{I}$  est le tenseur identité et  $\mu'$  est la viscosité secondaire souvent considérée comme  $\mu' = -\frac{2}{3}\mu$  de façon à ce que la viscosité de volume  $\mu' + \frac{2}{3}\mu$  soit égale à zéro [47]. Le champ de vitesse  $\mathbf{v}$  représente ici la variable de vitesse utilisée pour établir les équations de Navier–Stokes.

### 1.1.3 Écoulement incompressible

Les faibles vitesses et l'absence d'ondes de choc dans ces écoulements rendent possible l'utilisation d'une formulation incompressible pour leur modélisation. Par définition, un écoulement est incompressible si le volume élémentaire d'une particule fluide donnée ne varie pas au cours du temps. Mathématiquement, cela se traduit par

$$\lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = 0. \quad (1.6)$$

Une autre appellation moins fréquemment utilisée pour désigner ces écoulements est « isovolume ». Cette terminologie permet de mieux saisir la signification de cette approche : le volume de contrôle associé à chaque particule fluide reste constant, sans imposer de contrainte forte sur sa masse volumique.

L'un des avantages remarquable de cette approche réside dans le fait qu'elle fournit une équation supplémentaire qui permet notamment de résoudre le champ de pression sans nécessiter la résolution de l'équation d'énergie ou l'introduction de modèles supplémentaires. Dans le cas d'un écoulement incompressible à *densité constante*, l'équation modélisant la contrainte d'incompressibilité peut être déduite à partir des équations de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1.7)$$

En combinant l'équation de conservation de la masse incompressible  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  avec les équations de Navier–Stokes de conservation de la quantité de mouvement, on obtient un système d'équations



différentielles partielles permettant de décrire de manière complète le comportement du fluide. En effet, le problème incompressible (à densité constante) peut s'écrire sous la forme

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{\Pi}_s (-(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}) + \mathbf{f}_s, \quad (1.8a)$$

$$\rho^{-1} \nabla p = \mathbf{\Pi}_i (-(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \nu \nabla^2 \mathbf{v}) + \mathbf{f}_i, \quad (1.8b)$$

où  $\mathbf{\Pi}_s$  et  $\mathbf{\Pi}_i$  sont des opérateurs de projection solénoïdal et irrotationnel, respectivement, et  $\mathbf{f}_s$  et  $\mathbf{f}_i$  sont les parties non conservative et conservative des forces volumiques, respectivement. La première équation constitue une équation gouvernante sans terme de pression pour le champ de vitesse, tandis que la deuxième équation pour la pression est une fonctionnelle de la vitesse et est associée à une équation de Poisson pour la pression. Cette approche incompressible offre ainsi une solution élégante et autonome pour la résolution du champ de pression, ce qui est un atout majeur dans la modélisation des écoulements isovolumiques/incompressibles.

Cette formulation s'appuie sur l'hypothèse selon laquelle le champ de vitesse est solénoïdal. Cependant, dans un écoulement de mélange, il existe plusieurs représentations possibles du champ de vitesse. Chaque espèce  $k$  possède une vitesse  $\mathbf{v}_k$  définie comme la vitesse eulérienne moyennée des molécules d'espèce  $k$ . Dans une approche de simulation directe visant à résoudre l'intégralité de l'écoulement dans le domaine d'étude  $\Omega$ , l'objectif est de travailler avec une vitesse d'ensemble englobant le comportement de toutes ces espèces. Pour la modélisation de la vitesse d'ensemble, deux approches sont envisageables :

1. La vitesse  $\mathbf{w}$  moyennée par la masse totale du mélange et pondérée par la masse partielle  $\rho_k V_k$  de chaque espèce

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{k=1}^N \rho_k(t) V_k(t) \mathbf{v}_k(\mathbf{r}, t)}{\int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) dV} \quad (1.9)$$

où  $\rho_k$  et  $V_k$  sont la masse volumique et le volume partiel de l'espèce  $k$ , respectivement. Dans le cas d'un mélange binaire, cette vitesse s'exprime par

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \frac{(\rho_A(t) V_A(t)) \mathbf{v}_A(\mathbf{r}, t) + (\rho_B(t) V_B(t)) \mathbf{v}_B(\mathbf{r}, t)}{\int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) dV}. \quad (1.10)$$

En termes plus courants, ce champ de vitesse d'ensemble peut être qualifié de « vitesse barycentrique ». Cette représentation barycentrique est utilisée pour les bilans de quantité de mouvement et apparaît donc dans les équations de Navier–Stokes.

2. La vitesse  $\mathbf{u}$  moyennée par le volume total du mélange  $V$  et pondérée par le volume partiel de chaque espèce

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{k=1}^N V_k(t) \mathbf{v}_k(\mathbf{r}, t)}{V} = \sum_{k=1}^N \phi_k(t) \mathbf{v}_k(\mathbf{r}, t), \quad (1.11)$$

où  $\phi_k$  est la fraction volumique de l'espèce  $k$ . Dans le cas d'un mélange binaire, cette vitesse s'exprime par

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{V_A(t) \mathbf{v}_A(\mathbf{r}, t) + V_B(t) \mathbf{v}_B(\mathbf{r}, t)}{V}. \quad (1.12)$$

En termes plus courants, ce champ de vitesse d'ensemble peut être qualifié de « vitesse cinématique ».

Il est important de souligner que ces deux représentations du champ de vitesse sont équivalentes. Le choix entre l'une ou l'autre de ces représentations n'affecte que le système mathématique résultant et n'a aucune incidence sur la physique capturée. De plus ces deux champs de vitesse sont identiques lorsque les deux espèces du mélange ont les mêmes densités, ou dans le cas d'un fluide homogène. Dans ce contexte, la variation du volume élémentaire  $V$  est égale à la somme des variations des volumes partiels

de chaque espèce. En utilisant une équation de transport par  $\mathbf{v}_k$  pour  $V_k$  dans le domaine élémentaire  $\Delta$  de la particule, elle s'exprime par

$$\frac{dV}{dt} = \sum_{k=1}^N \frac{dV_k}{dt} = \sum_{k=1}^N \int_{\Delta} \left( \frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_k \mathbf{v}_k) \right) dV = \int_{\Delta} \nabla \cdot \mathbf{u} dV. \quad (1.13)$$

La contrainte d'incompressibilité dans le cas d'un écoulement de mélange se traduit donc par

$$\lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.14)$$

qui stipule que la vitesse moyennée par le volume doit être à divergence nulle. Il est important de noter que la vitesse moyennée par la masse  $\mathbf{w}$  n'est pas nécessairement solénoïdale dans le cas d'un écoulement inhomogène. Cette particularité est attribuée au fait que cette représentation du champ de vitesse dépend de la variation de masse au sein des volumes élémentaires associés à chaque particule. Cependant, ces deux représentations ne sont pas indépendantes et peuvent être reliées par le flux diffusif massique  $\mathbf{J}_k$ , ici exprimé par la loi de Fick :

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} - \sum_{k=1}^N \phi_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{w}) = \mathbf{u} - \sum_{k=1}^N \frac{\phi_k}{\rho_k} \mathbf{J}_k = \mathbf{u} + \rho \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^N D_{ki} \frac{\phi_k}{\rho_k} \nabla w_k \quad (1.15)$$

Dans le cas du mélange binaire à coefficients de diffusion égaux, la relation se simplifie et s'écrit

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \rho D \nabla \left( \frac{\phi_A}{\rho_A} w_A + \frac{\phi_B}{\rho_B} w_B \right) = \mathbf{u} + \rho D \nabla \left( \frac{1}{\rho_A} + \frac{1}{\rho_B} \right) = \mathbf{u} - \frac{D}{\rho} \nabla \rho. \quad (1.16)$$

En somme, *l'écoulement est considéré comme incompressible* du fait de ses faibles vitesses et son absence d'onde de choc. Cette hypothèse joue un rôle crucial en simplifiant le système d'équations, en introduisant une nouvelle équation  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , où  $\mathbf{u}$  représente la vitesse moyennée par le volume. En exploitant cette variable de vitesse, l'efficacité de la résolution incompressible est alliée avec la modélisation des effets de variation de masse par la loi de Fick.

#### 1.1.4 Écoulement turbulent libre et isotrope

Concernant le caractère turbulent de l'écoulement, l'objectif étant de comprendre l'interaction entre la turbulence et les effets de variation de masse, *l'écoulement est considéré comme pleinement isotrope*. Cette hypothèse est associée à un nombre de Reynolds  $Re \gg 1$  élevé, conjugué à un nombre de Froude  $Fr \geq 1$  dépassant l'unité. Ceci engendre un régime de convection forcée dans lequel les effets gravitationnels sont négligeables en comparaison des forces inertielles. Cette approche permet la modélisation de la dynamique du rejet loin de sa zone d'éjection, dans une région où la signature de l'émission a disparu. Elle facilite également la mise en place d'un modèle de THI pour les simulations numériques, modèle qui d'ailleurs est majoritairement utilisé pour les études fondamentales de la turbulence [49, 46, 41, 64]. Cette modélisation est accompagnée de conditions aux limites périodiques, pour simplifier la formulation numérique et faciliter l'utilisation de méthodes spectrales pour la discrétisation temporelle.

En s'associant avec les hypothèses précédentes, cette dernière modélisation permet de garantir que seules les dynamiques pertinentes à l'étude des structures turbulentes en présence de gradients de densité sont capturées.

### 1.1.5 Conclusion sur les hypothèses

Finalement, le mouvement fluide d'un rejet atmosphérique est modélisé par *l'écoulement turbulent isotrope, incompressible, isotherme et non réactif d'un mélange binaire de fluides newtoniens*. Les coefficients de diffusion moléculaire et de quantité de mouvement sont considérés comme constants.

Cette approche originale, qui prend en compte de fortes variations de densité tout en conservant une formulation incompressible, s'inspire des travaux antérieurs réalisés par LIVESCU et RISTORCELLI [51], DI PIERRO [20] et JACQUES [42]. Cette méthodologie permet notamment de s'affranchir de l'utilisation de modèles compressibles, peu adaptée pour la résolution d'écoulement à basse vitesse, et qui peuvent être plus lourds et complexes à implémenter sans apporter de physique supplémentaire. De plus, elle évite l'utilisation d'approximations de type Boussinesq, qui ne sont pas adaptées à l'étude de phénomènes à forts gradients de densité.

## 1.2 Formulation mathématique

Comme exposé qualitativement dans la section précédente, les émissions atmosphériques sont modélisées à l'aide d'un écoulement turbulent isotrope, incompressible, et non réactif d'un mélange binaire de fluides newtoniens. Cette formulation aboutit à un système d'équations qui peut être considéré comme une généralisation des équations de Navier–Stokes incompressibles au cas à densité variable. Dans la littérature, ce système d'équations est désigné sous le nom de Variable-Density<sup>1</sup> Incompressible Navier–Stokes Equations (VDINSE) (*Équations de Navier–Stokes incompressibles à densité variable*). Il est également connu comme le système de Kazhikhov–Smagulov, en hommage aux travaux pionniers de KAZHIKHOV et SMAGULOV [48] sur cette formulation. Dans ce document, les équations du problème incompressible sont désignées par l'acronyme VDINSE.

Cette section expose le développement du système d'équations jusqu'à sa forme finale adimensionnée, qui est utilisée dans le solveur DNS. Une solution pseudo-exacte permettant d'effectuer des essais numériques est également proposée. Pour une exploration plus approfondie des propriétés et du développement des VDINSE, des travaux de références sont disponibles dans la littérature. Parmi eux, les travaux de FRANK-KAMENETSKII [28, chapitres 1–2, 4] et ANTONTSEV, KAZHIKTOV et MONAKHOV [2, section 1.5] présentent le développement original du modèle. BEIRÃO DA VEIGA [4] et GUILLÉN-GONZÁLEZ, DAMÁZIO et ROJAS-MEDAR [37] explorent les propriétés du problème mathématique issu de cette formulation. JACQUES [42, section 1.1] apporte une approche détaillée de son développement dans le cas d'un écoulement de mélange incompressible. FRANCHI et STRAUGHAN [27] fournissent une comparaison du modèle avec une alternative pour la modélisation de polluants lourds et BRESCH, ESSOUFI et SY [8] proposent des modifications pour le traitement de combustions à faible Mach.

### 1.2.1 Équations du mouvement

Considérons un domaine triplement périodique et régulier  $\Omega \in \mathbf{R}^3$  d'un volume  $V$  délimitant l'espace d'étude. Dans ce domaine  $\Omega$ , se produit l'écoulement d'un fluide à deux composantes, A et B, et de densité  $\rho(\mathbf{r}, t)$ . Les deux composantes sont supposées avoir la même viscosité dynamique  $\mu$  (et viscosité secondaire  $\mu'$ ) ainsi que le même coefficient de diffusion moléculaire  $D = D_{AB} = D_{BA}$  l'une dans l'autre. Cette hypothèse a été détaillée dans la section précédente. Cette dynamique du fluide s'étend sur l'intervalle de temps  $[0, t_f]$ . En se référant à la section précédente, le champ de vitesse du fluide peut être représenté par la vitesse moyennée par la masse  $\mathbf{w} = (w_x, w_y, w_z)^\top$  ou la vitesse moyennée par le volume  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^\top$ . Ces deux représentations sont définies respectivement par les équations (1.10) et (1.12) page 8 et sont reliées par la loi de diffusion de Fick

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} - \frac{D}{\rho} \nabla \rho. \quad (1.17)$$

<sup>1</sup>Le terme « inhomogène » ou « non homogène » est également employé à la place d'« à densité variable » dans certains travaux de la littérature. Dans ce document, « à densité variable » est préféré afin d'éviter toute confusion avec l'homogénéité statistique de la turbulence.

La dynamique locale incompressible à densité variable est décrite par les équations de conservation de la quantité de mouvement et de conservation de la masse associées à la contrainte d'incompressibilité. Dans cette configuration, les équations de conservation de la quantité de mouvement (sous forme non conservative) s'obtiennent à partir de l'équation de quantité de mouvement de Cauchy sur la vitesse barycentrique  $\mathbf{w}$  et s'écrivent

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + (\mathbf{w} \cdot \nabla) \mathbf{w} \right) &= -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{f}_f, \\ &= -\nabla p + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^\top) + \mu' (\nabla \cdot \mathbf{w}) \mathbf{I}) + \rho \mathbf{f}_f, \\ &= -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{w} + \mu \nabla \cdot \nabla \mathbf{w}^\top + \mu' \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{w}) \mathbf{I} + \rho \mathbf{f}_f, \\ &= -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{w} + (\mu + \mu') \nabla (\nabla \cdot \mathbf{w}) + \rho \mathbf{f}_f. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Ici  $\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des contraintes d'un fluide newtonien défini par l'équation (1.5) page 7,  $p$  est le champ de pression et  $\mathbf{f}_f$  est une densité de force volumique qui sera utilisée par la suite pour forcer la turbulence. L'équation de conservation de la masse s'écrit également à partir de la vitesse barycentrique  $\mathbf{w}$  comme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{w}) = 0. \quad (1.19)$$

Les équations du mouvement sont obtenues en combinant ces équations de conservation avec la contrainte d'incompressibilité à densité variable :

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + (\mathbf{w} \cdot \nabla) \mathbf{w} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{w} + \rho \mathbf{f}_f, \quad (1.20a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{w}) = 0, \quad (1.20b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1.20c)$$

En utilisant la relation (1.17),  $\mathbf{w}$  peut être éliminé des équations et les équations du mouvement peuvent être écrites entièrement en fonction du champ de vitesse vitesse moyennée par le volume  $\mathbf{u}$  comme

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p' + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + D((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}_f \quad (1.21a)$$

$$+ \frac{D^2}{\rho} \left( (\nabla \rho \cdot \nabla) \nabla \rho - \frac{1}{\rho} \|\nabla \rho\|^2 \nabla \rho + \nabla \rho \nabla^2 \rho \right), \quad (1.21b)$$

$$p' = p + D \mathbf{u} \cdot \nabla \rho - D^2 \nabla^2 \rho + D(2\mu + \mu') \nabla^2 \ln \rho, \quad (1.21c)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = D \nabla^2 \rho, \quad (1.21d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1.21e)$$

Dans ce nouveau système,  $p'$  est un champ scalaire potentiel analogue à la pression, permettant de décrire le gradient de pression dans l'écoulement à densité variable. Par souci de simplicité, ce champ scalaire est désigné comme étant la pression et est symbolisé par  $p$  dans la suite du document. À la suite de l'introduction des effets de diffusion de masse, l'équation de quantité de mouvement (1.21a) présente maintenant trois termes sources en plus du gradient de pression et de la force volumique :

- Le terme visqueux  $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$  habituellement présent dans les équations incompressibles à densité constante.
- Un terme supplémentaire  $D((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u})$  introduit par la loi de diffusion de Fick. Ce terme s'apparente à première vue à un terme de diffusion en raison de sa forme en  $\nabla^2$ . Il représente le couplage au premier ordre entre le champ de vitesse  $\mathbf{u}$  et le déplacement des particules  $D \nabla \rho / \rho$  (homogène à une vitesse) résultant de la diffusion moléculaire.

- Un second terme supplémentaire en  $O(D^2)$  également introduit par la diffusion moléculaire. Ce terme représente les ordres supérieurs du phénomène de couplage cité précédemment.

Dans les modèles de Kazhikhov–Smagulov traitant de dynamiques à faible diffusion, le terme en  $O(D^2)$  est négligé par rapport aux autres termes sources [48, 4]. Cette simplification est également utilisée ici et est justifiée dans la sous-section suivante présentant les équations sous forme non dimensionnelle. L'application de cette dernière simplification se traduit par la forme finale des VDINSE utilisée pour cette étude :

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + D((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}_f, \quad (1.22a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = D \nabla^2 \rho, \quad (1.22b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (1.22c)$$

Le problème incompressible à densité variable peut donc se formuler sous la forme de deux équations différentielles orthogonales

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \Pi_s \left( -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{D}{\rho} ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u}) \right) + \mathbf{f}_s, \quad (1.23a)$$

$$\rho^{-1} \nabla p = \Pi_i \left( -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{D}{\rho} ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u}) \right) + \mathbf{f}_i, \quad (1.23b)$$

où  $\Pi_s$  et  $\Pi_i$  sont des opérateurs de projection solénoïdal et irrotationnel, respectivement, et  $\mathbf{f}_s$  et  $\mathbf{f}_i$  sont les parties non conservative et conservative des forces volumiques, respectivement.

### 1.2.2 Équations adimensionnées

Afin de généraliser la résolution des équations, le système d'équations (1.22) est maintenant adimensionné en introduisant une échelle caractéristique de densité  $\rho_c$ , de vitesse  $v_c$ , et de longueur  $L_c$  caractérisant le problème. Les équations sont alors réécrites en fonction des variables adimensionnées<sup>2</sup>

$$\rho^+ = \frac{\rho}{\rho_c}, \quad \mathbf{u}^+ = \frac{\mathbf{u}}{v_c}, \quad \mathbf{r}^+ = \frac{\mathbf{r}}{L_c}, \quad t^+ = \frac{t v_c}{L_c}, \quad p^+ = \frac{p}{\rho_c v_c^2} \quad (1.24)$$

et en introduisant le nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho_c v_c L_c}{\mu} \equiv \frac{\text{forces inertielles}}{\text{forces visqueuses}}, \quad (1.25)$$

et le nombre de Schmidt

$$Sc = \frac{\mu}{\rho_c D} \equiv \frac{\text{forces diffusifs visqueux}}{\text{forces diffusifs moléculaires}}. \quad (1.26)$$

En omettant par souci de lisibilité l'indice  $^+$ , caractérisant les variables sans dimension, les VDINSE sous forme non dimensionnelle s'écrivent

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \zeta(\rho, \mathbf{u}) + \mathbf{f}_f, \quad (1.27a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho = \frac{1}{Re Sc} \nabla^2 \rho, \quad (1.27b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.27c)$$

$$\zeta(\rho, \mathbf{u}) = \frac{1}{\rho Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho Re Sc} ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + (\nabla \rho \cdot \nabla) \mathbf{u}). \quad (1.27d)$$

<sup>2</sup>L'adimensionnement choisi ici pour la pression favorise la description des écoulements turbulents. Cependant, pour les écoulements visqueux, une alternative possible est  $p^+ = p L_c / \mu v_c$

Dans la suite du document, l'indice  $\cdot^+$  est systématiquement omis et toutes les variables présentées sont sans dimension. Cette représentation des équations, désignée sous le terme VDINSE est utilisée tout au long de l'étude.

Les équations adimensionnées permettent de généraliser la résolution, car elles ne dépendent plus des unités utilisées ou des échelles spécifiques du problème. Cette démarche est essentielle pour comparer différents cas et d'étudier les phénomènes à des échelles relatives, indépendamment des valeurs spécifiques des constantes caractéristiques de chaque composante fluide. Notamment, cette approche permet de caractériser la dynamique de l'écoulement uniquement avec deux paramètres : le nombre de Reynolds et le nombre de Schmidt. Afin de décrire la condition initiale, un troisième paramètre sans dimension,

$$s = \frac{\rho_A}{\rho_B} = \frac{\max_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t = 0)}{\min_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t = 0)}, \quad (1.28)$$

est introduit, caractérisant le rapport de densité entre les deux espèces composant le fluide. Ce paramètre sans dimension peut être relié au nombre d'Atwood, couramment employé dans l'étude des écoulements multiphasiques, par

$$At = \frac{s - 1}{s + 1}. \quad (1.29)$$

En ce qui concerne les valeurs de ces paramètres pour cette étude, des mesures effectuées à température standard  $T^0 = 273.15$  K, notamment par GUALTIERI et al. [35], ont démontré que le nombre de Schmidt se situe autour de l'unité, pour les émissions atmosphériques de méthane, dioxyde de carbone, d'éthanol et de méthanol. Le nombre de Reynolds, quant à lui, doit être au minimum être de l'ordre de plusieurs centaines. Dans les modèles de THI, une valeur minimale de  $Re \geq 1000$  est couramment employée [79, 46, 41] pour le nombre de Reynolds basé sur l'échelle intégrale. La simplification des termes en  $O(D^2)$  réalisée dans la section 1.2.1 trouve ici sa justification. En effet, sous forme adimensionnée, ces termes sont proportionnels à  $O(1/(Re^2 Sc^2))$ . Avec un nombre de Schmidt voisin de l'unité et un nombre de Reynolds de plusieurs centaines, les termes négligés se situent 4 à 5 ordres de grandeur en dessous des autres.

Finalement, le rapport de densité  $s$  se situe entre l'unité et une dizaine. En effet, pour un mélange  $CO_2$ -air, ce rapport est de 2, tandis que pour un mélange  $SF_6$ -air, il atteint 6 dans les conditions standard. Dans le cadre des cas de test, des valeurs plus élevées sont explorées, principalement pour évaluer la robustesse des méthodes numériques. Pour les simulations de cette étude, des valeurs allant de 2 à 8 sont prises en considération. Ainsi, la modélisation est paramétrée par

$$Re \approx 1000, \quad Sc \approx 1, \quad s \in [2, 8]. \quad (1.30)$$

### 1.2.3 Solution pseudo-exacte

En vue de disposer d'un moyen de vérifier les méthodes numériques de résolution, une solution pseudo-exacte des équations (1.27) est introduite, inspirée des travaux de DI PIERRO et ABID [21, section 4.1]. Cela s'effectue en apportant une modification aux équations par l'ajout d'un terme source. En effet, si l'on choisit un terme de forçage  $\mathbf{f}_f$  tel que

$$\mathbf{f}_f(\mathbf{u}, \rho, p) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \frac{\nabla p}{\rho} - \zeta(\rho, \mathbf{u}) \quad (1.31)$$

alors

$$u_{x_e}(x, y, z, t) = \cos(t) \sin(x) \cos(y) \cos(z), \quad (1.32a)$$

$$u_{y_e}(x, y, z, t) = \cos(t) \cos(x) \sin(y) \cos(z), \quad (1.32b)$$

$$u_{z_e}(x, y, z, t) = -2 \cos(t) \cos(x) \cos(y) \sin(z), \quad (1.32c)$$

$$\rho_e(x, y, z, t) = 1 + \frac{1}{2}(s - 1)(1 + \sin(t) \sin(x) \sin(y) \sin(z)), \quad (1.32d)$$

$$p_e(x, y, z, t) = \sin(t) \sin(2x) \sin(2y) \sin(2z), \quad (1.32e)$$

constitue une solution exacte  $(\mathbf{u}_e = (u_{x_e}, u_{y_e}, u_{z_e})^\top, \rho_e, p_e)$  des équations (1.27).

Ainsi, si l'on considère une solution numérique  $(\mathbf{u}, \rho, p)$  obtenue par intégration temporelle utilisant un pas de temps  $\delta t$ , et en prenant comme condition initiale les valeurs de  $(\mathbf{u}_e, \rho_e, p_e)$  évaluées à  $t = 0$ , alors les erreurs temporelles par rapport à la solution exacte au temps  $t = n\delta t$  sont définies par

$$\epsilon_{\mathbf{u}} = \|\mathbf{u}(n\delta t) - \mathbf{u}_e(t)\|_2, \quad (1.33a)$$

$$\epsilon_{\rho} = \|\rho(n\delta t) - \rho_e(t)\|_2, \quad (1.33b)$$

$$\epsilon_p = \|p(n\delta t) - p_e(t)\|_2. \quad (1.33c)$$

### 1.2.4 Conclusion sur la formulation mathématique

La formulation mathématique des hypothèses énoncées dans la section 1.1 conduit à un système d'équations qui présente des similitudes avec les équations de Navier–Stokes incompressibles. Ce système présente une équation de quantité de mouvement, accompagnée d'un terme source supplémentaire et comprenant des coefficients en  $\rho^{-1}$ , où  $\rho(\mathbf{r}, t)$  est désormais une fonction de l'espace du temps. Une équation de diffusion est également introduite pour régir l'évolution du champ de densité. De manière similaire au cas incompressible à densité constante, la contrainte d'incompressibilité est exprimée par  $\nabla \cdot \mathbf{u}$ , où  $\mathbf{u}$  est la vitesse moyennée par le volume.

L'adimensionnement des équations permet de caractériser la dynamique de l'écoulement par trois paramètres sans dimension :

$$Re = \frac{\rho_c v_c L_c}{\mu}, \quad s = \frac{\max_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t = 0)}{\min_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t = 0)}, \quad Sc = \frac{\mu}{\rho_c D}. \quad (1.34)$$

Ces paramètres, associés à une condition initiale  $(\mathbf{u}, \rho, p)(t = 0)$ , constituent les données d'entrées de nos simulations numériques. En injectant un terme de forçage spécifique, il est possible de développer une solution exacte des équations modifiées, permettant ainsi de mesurer l'exactitude des méthodes numériques temporelles.

Maintenant que les équations du problème sont développées, la section suivante se penche sur le modèle turbulent utilisé pour simuler la turbulence dans ce contexte.

## 1.3 Turbulence Homogène Isotrope

La turbulence émerge de manière intrinsèque au sein des équations de la dynamique développées dans la section précédente, lorsque les conditions requises sont réunies. Dans le cas d'une étude visant à analyser les structures de la turbulence, en excluant toutes interférences avec des phénomènes externes, il est recommandé d'opter pour un modèle dans lequel la totalité du domaine de calcul est occupée par la turbulence. Dans le cas de cette étude, les variations de masse sont intrinsèques à l'écoulement et ne sont pas causées par des phénomènes extérieurs. Par conséquent, l'utilisation d'un tel modèle s'avère indispensable pour une analyse efficace de la dynamique.

Toutefois, lors de l'observation d'un rejet atmosphérique, il est constaté que l'écoulement dans son ensemble n'est pas uniformément turbulent. Selon les hypothèses énoncées, il convient de se placer dans une région de l'écoulement, située à distance de la zone d'émission, où l'écoulement est turbulent et où un comportement isotrope est observé (voir figure 0.1). Dans une telle région  $\Omega$ , l'écoulement peut être raisonnablement considéré comme uniformément turbulent. Ce choix permet notamment de s'affranchir d'une résolution totale de l'écoulement, qui n'est pas essentielle pour mener à bien l'étude fondamentale des structures turbulentes.

Le modèle Turbulence Homogène Isotrope (THI) permet la simulation d'un écoulement turbulent occupant la totalité du domaine d'étude, en imposant deux conditions sur les champs fluctuants turbulents :

- Homogénéité : leurs propriétés statistiques doivent être distribuées de manière homogène dans l'espace, en d'autres termes, elles doivent être invariantes par translation.

- Isotropie : leurs propriétés statistiques doivent être uniformes dans toutes les directions, c'est-à-dire qu'elles doivent être invariantes par rotation et réflexion.

Ces conditions sont satisfaites par notre hypothèse de région d'écoulement isotrope turbulent, située à distance de la zone d'émission. Cette modélisation simule la turbulence dans une boîte  $\Omega$  de taille  $L_\Omega$ , soigneusement choisie pour inclure l'ensemble des caractéristiques spatiales de l'écoulement, tout en étant suffisamment petite pour être considérée comme périodique. La périodicité est ici utilisée pour reproduire le fait qu'on ne simule qu'une région spécifique statistiquement représentative d'un écoulement ouvert à grande échelle<sup>3</sup>.

Il est important de signaler que par la suite, cette forme spécifique de turbulence est également désignée sous le terme de « turbulence isotrope ». D'un point de vue mathématique, étant donné que toute translation est une combinaison de deux rotations, un champ fluctuant statistiquement isotrope est forcément statistiquement homogène [15]. L'appellation « THI » est en réalité inutilement précise, cependant, elle est communément acceptée et utilisée dans la littérature scientifique.

Bien que cette approche puisse être sujette à des critiques en raison de sa simplification, sa facilité d'implémentation en fait néanmoins la méthode privilégiée pour les études fondamentales sur la turbulence dans le cadre de travaux académiques [49, 79, 41, 64]. Des recherches expérimentales s'efforcent également de reproduire ces conditions en utilisant des grilles générant une turbulence quasi isotrope [63]. De plus, les travaux précurseurs de KOLMOGOROV [50] et les études qui ont suivi [75, 24] ont démontré qu'il existe de nombreuses caractéristiques universelles au niveau des processus physiques fondamentaux des écoulements turbulents, qui se manifestent dans cette situation idéalisée, indépendamment de l'origine de la turbulence.

Par conséquent, le modèle de THI est retenu comme le modèle turbulent approprié pour cette étude fondamentale sur la turbulence à densité variable. La section 1.3.1 présente les équations de la THI, et les sections 1.3.2 à 1.3.3, quant à elles, présentent les différentes grandeurs utilisées pour étudier sa dynamique. Il est essentiel de souligner que ces sections ne proposent pas un développement complet des équations. L'objectif est de présenter de manière concise les grandeurs utilisées au cours de l'étude. Pour des informations plus détaillées sur la théorie, il est recommandé de se référer au cours de CAZALBOU et FONTANE [15] ou aux ouvrages de POPE [63] et SAGAUT et CAMBON [71].

### 1.3.1 Équations de la turbulence isotrope

L'étude des écoulements turbulents est complexe en raison de leurs propriétés inhérentes d'instabilité, de tridimensionnalité et de sensibilité aux perturbations. Pour surmonter ces difficultés, l'approche statistique est devenue rapidement, suite aux travaux fondateurs de REYNOLDS [68], un moyen approprié tant pour l'analyse expérimentale que pour l'étude numérique. Cette approche repose sur la décomposition (dite de Reynolds) de chaque champ de l'écoulement  $\varphi$ , en une valeur moyenne  $\bar{\varphi}$  et une fluctuation  $\varphi'$ . En utilisant cette décomposition, il est possible d'exprimer la dynamique de l'écoulement moyen dans le contexte d'une turbulence incompressible à densité constante par le système d'équations (sous forme indicelle)

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \overline{v'_i v'_j} \right), \quad (1.35a)$$

$$\frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_j} = 0. \quad (1.35b)$$

Une observation notable concerne la présence du tenseur de Reynolds  $\overline{v'_i v'_j}$  dans l'équation de la quantité de mouvement, dont la trace est reliée à l'énergie cinétique turbulente  $\bar{e}_c = \frac{1}{2} \overline{v'_i v'_i}$  par unité de masse<sup>4</sup>. L'étude de la dynamique d'un écoulement turbulent nécessite donc l'analyse approfondie de l'énergie

<sup>3</sup>Les conditions aux limites périodiques favorisent également l'implémentation de méthodes spectrales pour la discrétisation spatiale.

<sup>4</sup>Dans les études à densité variable, il est important de faire la différence entre l'énergie cinétique par unité de volume  $\frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2$  et l'énergie cinétique par unité de masse  $\frac{1}{2} \mathbf{v}^2$ .



cinétique turbulente, dont l'évolution est régie par

$$\frac{\partial \bar{e}_c}{\partial t} + \bar{v}_j \frac{\partial \bar{e}_c}{\partial x_j} = \underbrace{-\overline{v'_i v'_j} \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j}}_{(1)} - \underbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p v'_j}}{\partial x_j}}_{(2)} - \underbrace{\frac{\partial \overline{v'_i v'_j v'_j}}{\partial x_j}}_{(3)} + \underbrace{\frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{e}_c}{\partial x_j \partial x_j}}_{(4)} - \underbrace{\frac{1}{Re} \left( \frac{\partial v'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v'_j}{\partial x_i} \right)}_{(5)} \quad (1.36)$$

où (1) est le terme de production, (2) est le terme de diffusion par fluctuation du champ de pression, (3) est le terme de diffusion par fluctuation du champ de vitesse, (4) est le terme de diffusion visqueuse, et (5) est le terme de dissipation visqueuse [15]. En adoptant l'hypothèse de THI, cette équation subit une simplification significative, se réduisant à

$$\frac{\partial \bar{e}_c}{\partial t} = \mathbf{v} \cdot \frac{1}{Re} \nabla^2 \mathbf{v}. \quad (1.37)$$

Ainsi, dans ce contexte, l'énergie cinétique turbulente est totalement et irréversiblement convertie en énergie interne. On saisit ici l'importance capitale de cette modélisation. Dans ce cadre, l'énergie cinétique turbulente peut être résolue directement sans recourir à des modèles approximatifs pour le tenseur de Reynolds.

Cependant, du fait que l'équation d'énergie ne comporte plus de terme de production, il devient nécessaire d'injecter de l'énergie à l'aide d'une méthode de forçage pour éviter la dissipation totale de la turbulence. Cette approche, connue sous le nom de « THI forcée », est expliquée plus en détail dans le chapitre 3. Une alternative consiste à réaliser des simulations de THI en déclin, où l'on impose une condition initiale de vitesse ou un spectre d'énergie, puis on étudie la dynamique de la turbulence lors de sa dissipation. Dans le cadre de cette étude, la turbulence observée dans les rejets atmosphériques étant forcée par le jet d'émission, l'approche de THI forcée est préférée.

Dans le cas d'un écoulement à densité variable, l'équation de l'énergie cinétique turbulente par unité de volume  $\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}$ , peut être dérivée à partir des équations (1.27) de la dynamique. Puisqu'il s'agit d'une turbulence forcée, l'énergie est entièrement apportée par le terme de forçage  $\mathbf{f}_f$  et il n'est donc pas nécessaire de considérer un champ moyen distinct. Par conséquent, par la suite, le champ de vitesse total  $\mathbf{u}$  et le champ de vitesse des perturbations  $\mathbf{u}'$  sont donc égaux. Cette simplification permet d'aborder plus aisément l'étude de la turbulence dans ce contexte à densité variable. L'équation de l'évolution de l'énergie cinétique par unité de volume  $e_c$  se développe donc comme

$$\frac{De_c}{Dt} = \rho \frac{D(\frac{1}{2} \mathbf{u}^2)}{Dt} + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \frac{D\rho}{Dt} = \mathbf{u} \cdot \left( -\nabla p + \rho \zeta(\rho, \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}_f + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{u}}{Re Sc} \nabla^2 \rho \right) \quad (1.38)$$

où  $D/Dt \equiv \partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)$ , et l'équation de l'évolution de l'énergie cinétique totale

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} e_c dV = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{f}_f dV + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \left( \rho \zeta(\rho, \mathbf{u}) + \frac{1}{2} \frac{\mathbf{u}}{Re Sc} \nabla^2 \rho \right) dV, \quad (1.39)$$

s'obtient en intégrant l'équation (1.38) sur  $\Omega$ , et en annulant donc les termes de flux. Cette dernière équation est essentielle dans l'élaboration de la méthode de forçage, qui est exposée dans le chapitre 3.

### 1.3.2 Spectre d'énergie

La caractérisation du régime turbulent par l'existence de fluctuations des champs sur une large gamme continue d'échelles conduit à considérer l'écoulement comme la superposition de structures tourbillonnaires de tailles variées. Les corrélations en un seul point fournissent des informations sur l'intensité du mouvement turbulent, mais elles ne permettent pas de déterminer la taille des structures tourbillonnaires associées. Pour cette raison, la dynamique turbulente est souvent étudiée en utilisant des corrélations en deux points. Cette approche intègre la notion de distance en introduisant une séparation spatiale entre les points où les fluctuations sont corrélées. En adoptant cette méthodologie, des informations supplémentaires sur la taille et la structure des tourbillons associés aux fluctuations sont obtenues, contribuant ainsi à décrire de la turbulence à différentes échelles spatiales.

Une des grandeurs dérivées de la théorie des corrélations à deux points, largement utilisée pour décrire la turbulence, est le spectre d'énergie turbulente  $E(k)$ . Le spectre est également appelé densité spectrale d'énergie, et il joue un rôle central dans la caractérisation des fluctuations de l'énergie turbulente à différentes échelles spatiales. Cette grandeur fournit des informations sur la distribution de l'énergie dans le spectre des fréquences spatiales, permettant ainsi de comprendre comment l'énergie est répartie dans les différentes structures tourbillonnaires de l'écoulement. Plus exactement, la représentation spectrale de l'espace permet de calculer l'énergie associée à chaque taille de tourbillons (associée à un mode de Fourier  $k$ ). Ainsi, le spectre d'énergie  $E(k)$  permet de caractériser le niveau d'énergie présent dans chaque gamme de tailles de tourbillons, fournissant des informations précieuses sur la distribution et le transfert d'énergie entre les différentes échelles.

D'un point de vue mathématique, le spectre d'énergie est défini pour caractériser l'information spectrale de l'énergie cinétique par unité de masse,

$$\bar{e}_c(t) = \frac{1}{2} \overline{u_i u_i}(t) = \frac{1}{2} \lim_{r \rightarrow 0} Q_{ii}(\mathbf{r}, t), \quad (1.40)$$

qui est liée à la restriction locale de la trace du tenseur de corrélation double du champ de vitesse  $Q_{ij}(\mathbf{r}, t)$ . Son information spectrale est donc accessible via transformation de Fourier tridimensionnelle du tenseur  $\mathbf{Q}$  :

$$Q_{ii}(\mathbf{r}, t) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \hat{Q}_{ii}(\mathbf{k}, t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3\mathbf{k} \quad (1.41)$$

En simplifiant l'intégrale avec les hypothèses de la THI, on obtient que

$$E(k, t) = 2\pi k^2 \hat{Q}_{ii}(k, t), \quad \text{avec} \quad \bar{e}_c(t) = \int_0^{+\infty} E(k, t) dk. \quad (1.42)$$

Dans le cas à densité variable, le spectre  $E_\rho(k)$  d'énergie cinétique par unité de volume  $e_c$  est obtenu à partir du tenseur de corrélation double  $\mathbf{Q}_\rho$  de  $\sqrt{\rho}\mathbf{u}$  et s'exprime comme

$$E_\rho(k, t) = 2\pi k^2 \hat{Q}_{\rho, ii}(k, t), \quad \text{avec} \quad e_c(t) = \frac{1}{2} \overline{\rho u_i u_i} = \int_0^{+\infty} E(k, t) dk. \quad (1.43)$$

Le détail des calculs en supposant, grâce aux conditions de THI, que le vecteur de séparation  $\mathbf{r}$  est aligné sur la coordonnée spectrale  $k_3$ , est le suivant :

$$\begin{aligned} Q_{ii}(\mathbf{r}, t) &= \int_0^{+\infty} \left( \int_0^\pi \left( \int_0^{2\pi} \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 \exp(ikr \cos \theta) \sin \theta d\gamma \right) d\theta \right) dk, \\ &= \int_0^{+\infty} \left( \int_0^\pi \left( \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 \exp(ikr \cos \theta) \sin \theta \int_0^{2\pi} d\gamma \right) d\theta \right) dk, \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} \left( \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 \int_0^\pi \exp(ikr \cos \theta) \sin \theta d\theta \right) dk, \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} \left( \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 \int_{-1}^{+1} \exp(ikru) du \right) dk, \quad u = \cos \theta, \\ &= 4\pi \int_0^{+\infty} \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 dk, \\ \bar{e}_c &= \frac{1}{2} \lim_{r \rightarrow 0} Q_{ii}(\mathbf{r}, t) = 2\pi \int_0^{+\infty} \hat{Q}_{ii}(k, t) k^2 dk. \end{aligned}$$

Numériquement, les spectres sont calculés à partir de la somme  $S = \sum_{i=1}^3 |\hat{\varphi}_i|^2$  des carrés des transformées de Fourier de  $\varphi = \mathbf{u}$  ou  $\varphi = \sqrt{\rho}\mathbf{u}$ . Un histogramme généralisé est ensuite réalisé, calculant la moyenne des valeurs de  $S$  dans chacune des  $N$  tranches de  $\|\mathbf{k}\|$ , où  $N$  est le nombre de points de discrétisation dans chacune des directions de l'espace. Le préfacteur  $2\pi$  est finalement appliqué sur les valeurs de l'histogramme pour obtenir le spectre.

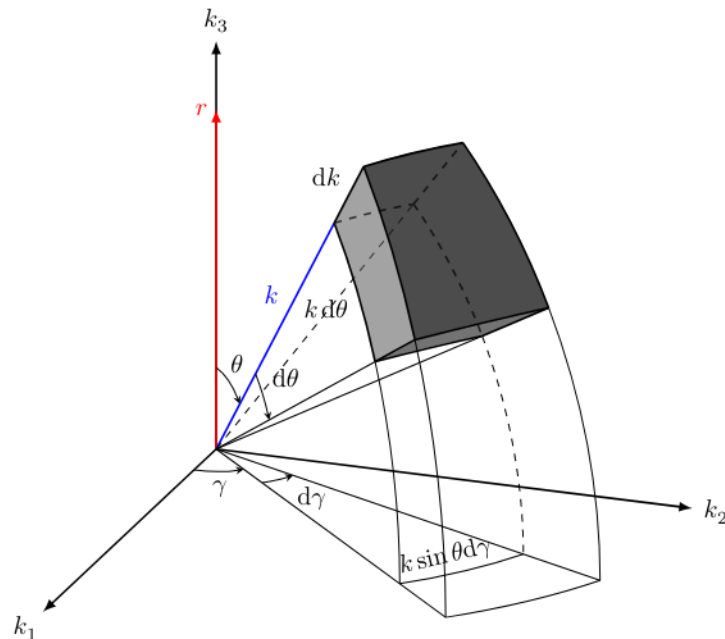


Figure 1.1 : Illustration de l'intégration dans l'espace spectral du spectre d'énergie de la THI

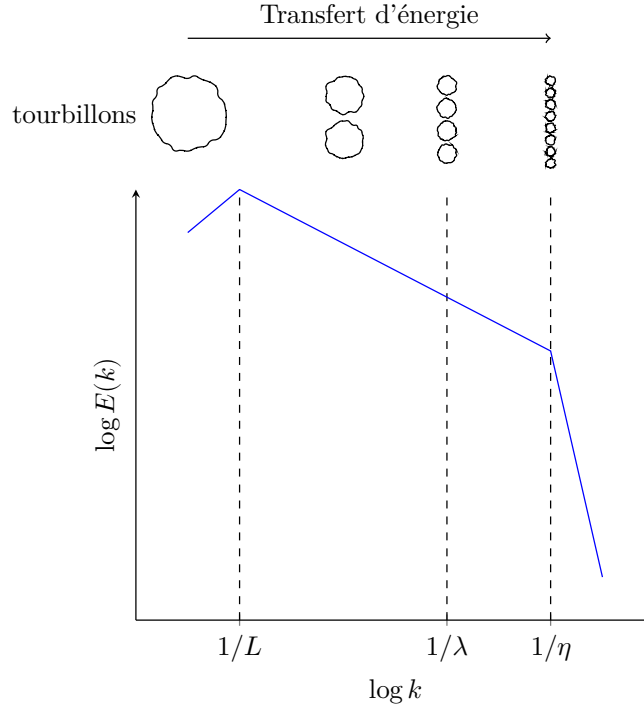
### 1.3.3 Échelles spatiales de la turbulence

Les travaux fondateurs sur l'universalité de la dynamique turbulente, menés au milieu du 20e siècle par notamment, KOLMOGOROV [50] ont démontré que les spectres de THI peuvent être divisés en trois zones distinctes, représentées dans la figure 1.2 :

1. La « zone d'injection », associée aux grandes échelles et au processus d'injection de l'énergie. Elle est délimitée par le premier mode et l'échelle intégrale  $L$ . Dans cette zone, le spectre est dépendant du problème. L'échelle intégrale correspond à la taille des tourbillons contenant la majorité de l'énergie cinétique de l'écoulement.
2. La « zone inertielle », associée à la cascade d'énergie et délimitée par  $L$  et l'échelle de Taylor  $\lambda$ . Dans cette zone, l'énergie est transférée entre différentes structures tourbillonnaires sous forme de chaleur sans pertes significatives. Les travaux de KOLMOGOROV [50] montrent que le spectre suit une loi en  $E(k) \sim k^{-5/3}$  dans la zone inertielle. Cette loi en puissance  $k^{-5/3}$  est maintenant connue sous le nom de « loi de Kolmogorov » et est l'une des découvertes les plus importantes dans l'étude de la turbulence. L'échelle de Taylor correspond à la plus grande des échelles dissipatives. En dessous de cette échelle, le mouvement turbulent est sujet à de forts effets visqueux, dissipant l'énergie cinétique en énergie interne.
3. La « zone dissipative » associée aux plus petites échelles et délimitée par  $\lambda$  et l'échelle de Kolmogorov  $\eta$ . Dans cette gamme, l'énergie turbulente fluctuante est dissipée sous forme de chaleur par les effets visqueux. Cela conduit à une atténuation rapide de l'énergie turbulente à partir de l'échelle de Taylor. L'échelle de Kolmogorov correspond à la plus petite taille de tourbillons présente dans l'écoulement.

Les différentes échelles associées à ces zones peuvent être déterminées à partir du spectre d'énergie  $E(k)$  :

$$L = \frac{3\pi}{4} \int_0^{+\infty} k^{-1} E(k) dk \Big/ \int_0^{+\infty} E(k) dk, \tag{1.44a}$$



**Figure 1.2** : Illustration de la cascade du spectre d'énergie  $E(k)$  d'un écoulement de THI.  $L$  représente l'échelle intégrale,  $\lambda$  l'échelle de Taylor et  $\eta$  l'échelle Kolmogorov.

$$\lambda = \left( 5 \int_0^{+\infty} E(k) dk \Big/ \int_0^{+\infty} k^2 E(k) dk \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.44b)$$

$$\eta = \left( \frac{\lambda^2 L^2}{15 Re_L^2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (1.44c)$$

Numériquement, l'intégration du spectre est réalisée de 0 à  $k_{\max}$  en utilisant la méthode des trapèzes, où  $k_{\max}$  représente le plus grand mode capturé par la discrétisation spatiale. Il est important de rappeler que toutes les variables sont ici adimensionnées. L'expression de l'échelle de Kolmogorov est obtenue à partir de la formule dimensionnelle classiquement utilisée

$$\eta = \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (1.45)$$

et en injectant  $\nu = \langle u \rangle L / Re_L$  et  $\varepsilon = 15\nu(\langle u \rangle / \lambda)^2$  [46], où  $Re_L$  correspond au nombre de Reynolds construit sur l'échelle intégrale  $L$  et la vitesse caractéristique  $\langle u \rangle$  telle que

$$\frac{3}{2} \langle u \rangle^2 = \int_0^{+\infty} E(k) d(k). \quad (1.46)$$

Dans la suite de l'étude, c'est ce nombre de Reynolds basé sur  $L$  qui est choisi comme paramètre de contrôle. Il n'est donc plus précisé qu'il est basé sur l'échelle intégrale et il est simplement noté  $Re$ . Il est possible de construire un second nombre de Reynolds  $Re_\lambda$ , basé cette fois sur l'échelle de Taylor  $\lambda$  et la vitesse caractéristique  $\langle u \rangle$ . Ce second nombre de Reynolds est fréquemment utilisé dans la littérature scientifique consacrée à l'étude de la turbulence, car il permet de caractériser la dynamique des plus petits tourbillons de l'écoulement. En outre, c'est une grandeur caractéristique utilisée pour quantifier

la séparation des échelles. En conséquence, il est fréquemment désigné sous l'appellation de « nombre de Reynolds turbulent ». Il peut être relié au nombre de Reynolds intégral via le rapport d'échelles :

$$Re_\lambda = \frac{\lambda}{L} Re. \quad (1.47)$$

À partir de ces grandeurs, il est également possible de définir une échelle temporelle caractéristique de la dynamique des plus grandes structures, connue sous le nom de temps de retournement. Cette échelle caractéristique est symbolisée  $T$  et s'exprime par

$$T = \frac{L}{\langle u \rangle}. \quad (1.48)$$

Dans le contexte à densité variable, toutes ces échelles peuvent également être calculées à partir du spectre d'énergie par unité de volume  $E_\rho(k)$  et sont notées avec un indice  $\cdot_\rho$  :  $L_\rho$ ,  $\lambda_\rho$ ,  $\eta_\rho$ ,  $\langle u \rangle_\rho$ ,  $Re_{\lambda_\rho}$ ,  $Re_{L_\rho}$ .

# Chapitre 2

## Méthodes numériques

### Table des matières

---

2.1	Simulation numérique directe . . . . .	22
2.1.1	Calculs spectraux via FFT . . . . .	23
2.1.2	Projection pour la résolution du problème à densité variable . . . . .	24
2.2	Schémas d'avancement temporel . . . . .	25
2.2.1	Runge–Kutta 2 . . . . .	26
2.2.2	Runge–Kutta 3 . . . . .	27
2.2.3	Strong-Stability Preserving Runge–Kutta 3 . . . . .	28
2.2.4	Runge–Kutta 4 . . . . .	29
2.2.5	Runge–Kutta 2/Crank–Nicholson . . . . .	29
2.2.6	Runge–Kutta 3/Crank–Nicholson . . . . .	31
2.2.7	Conclusions sur les méthodes d'intégration temporelles . . . . .	32
2.3	Préconditionnement des opérateurs à densité variable . . . . .	32
2.3.1	Opérateur de diffusion . . . . .	36
2.3.2	Opérateur de pression . . . . .	36
2.4	Validation . . . . .	40
2.4.1	Instabilité de Rayleigh–Taylor bidimensionnelle . . . . .	41
2.4.2	Instabilité d'un jet tourbillonnait à densité variable . . . . .	42
2.4.3	Performances . . . . .	44
2.5	Simulations et post-traitement . . . . .	44
2.5.1	Centres de calculs . . . . .	45
2.5.2	Module de post-traitement ROAST . . . . .	45

---

Ce chapitre se focalise sur la méthode numérique développée pour simuler les écoulements turbulents incompressibles, à densité variable, et avec diffusion de masse. Il est important de souligner que dans cette configuration, le champ de densité est traité comme un scalaire actif de l'écoulement et peut présenter des profils raides en raison des effets de transport et d'étirement. La résolution d'un tel écoulement incompressible requiert l'utilisation de méthodes numériques adaptées. Une série de tests approfondis a été réalisée afin de parvenir à un modèle numérique capturant la dynamique recherchée. L'objectif de ce chapitre n'est pas seulement de présenter le modèle final, mais aussi de décrire l'approche adoptée et les nombreux essais effectués pour aboutir à ce modèle. Les résultats obtenus lors de ces différentes étapes peuvent également fournir des informations pertinentes pour d'autres applications (combustion et météorologie, par exemple).

Le section 2.1 présente la méthodologie utilisée pour la Direct Numerical Simulation (DNS, *Simulation Numérique Directe*), notamment le choix des méthodes spectrales et la technique de projection. La

section 2.2 détaille le choix de la méthode d'intégration temporelle et l'accent est porté sur le traitement semi-implicite des équations. Ce traitement nécessite l'utilisation de solveurs itératifs, pour résoudre les opérateurs liés à la résolution de la pression et au problème de diffusion. Dans la section 2.3, le préconditionnement de ces opérateurs implicites est présenté. Le choix du solveur itératif pour l'inversion de ces opérateurs est également discuté. Enfin, dans la section 2.4, le modèle numérique, qui combine le schéma spectral, la procédure d'avancement temporel et le préconditionnement des opérateurs à densité variable, est validé sur des cas déjà connus de la littérature : la RTI et le jet tourbillonnant.

## 2.1 Simulation numérique directe

Dans la continuité du modèle théorique développé dans le chapitre précédent, on considère l'écoulement turbulent (ou transitionnel) d'un fluide qui se produit dans un domaine cubique borné  $\Omega$ . Les champs turbulents sont supposés périodiques dans chaque direction du système de coordonnées cartésiennes et évoluent à l'intérieur de la boîte périodique de taille  $(2n\pi)^3$ . De cette façon, les champs de l'écoulement peuvent être développés en séries de Fourier.

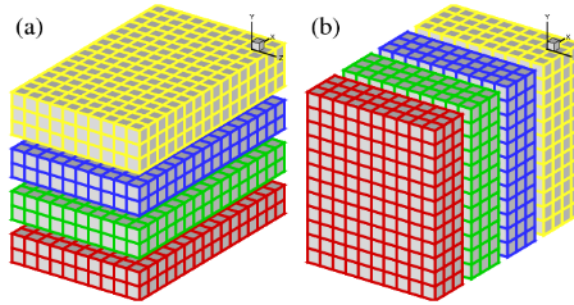
Comme détaillé dans les ouvrages de PEYRET [62] et CANUTO et al. [13], les méthodes spectrales sont des techniques largement reconnues dans l'étude fondamentale de la mécanique des fluides en raison de leur précision : l'erreur diminue de manière exponentielle à mesure que la résolution augmente, à condition de travailler avec des solutions régulières. Les hypothèses formulées dans cette étude supposent que les solutions des écoulements incompressibles à densité variable, sans discontinuités, présentent ces propriétés de régularité. Par conséquent, les méthodes spectrales sont choisies pour la discrétisation spatiale en raison de leur grande précision. Les simulations sont réalisées avec le solveur spectral POUSSINS (Parallel Open-source Unsteady Spectral Solver for Inhomogeneous Navier–Stokes), développé à l'origine par BASTIEN DI PIERRO [20, 21] pour la simulation de jets incompressibles à densité variable. Au cours de cette étude, des améliorations ont été apportées afin d'améliorer l'efficacité de l'opérateur de projection sur un sous-espace incompressible. De plus, une résolution semi-implicite des termes de diffusion a été implémentée et un module permettant la simulation de la turbulence isotrope au sein d'un écoulement à densité variable a été ajouté.

Les méthodes spectrales font partie de la famille des méthodes des résidus pondérés, où la sélection des fonctions de base et d'essai distingue différentes approches. Les fonctions de base permettent de développer une solution en série, tandis que les fonctions d'essai visent à garantir que la série d'approximations satisfait l'équation différentielle avec la plus grande précision possible. Le choix des fonctions de base dépend principalement des conditions aux limites du problème en question. Parmi les classes de polynômes existantes, trois sont couramment utilisées dans ce contexte : Fourier, Chebyshev et Legendre. En ce qui concerne les fonctions d'essai, il y a généralement trois options disponibles :

1. Opter pour les mêmes fonctions de base et d'essai conduit au schéma spectral de Galerkin.
2. Choisir des fonctions delta de Dirac centrées sur les nœuds du maillage conduit au schéma de collocation (ou schéma pseudospectral<sup>1</sup>).
3. Si on a l'intention d'utiliser des fonctions de base et de test qui ne satisfont pas les conditions aux limites, le schéma spectral tau est utilisé à la place.

Dans les travaux présentés ici, un schéma pleinement spectral Fourier–Fourier (Galerkin) est utilisé. L'utilisation des polynômes de Fourier facilite la mise en œuvre de conditions aux limites spatiales périodiques et permet un accès direct aux différents modes associés aux structures tourbillonnaires de la turbulence isotrope. Ce schéma s'est déjà avéré très efficace dans les problèmes fondamentaux de la dynamique des fluides [40, 57], et a été largement utilisé pour la DNS de THI [49, 79, 81, 41].

<sup>1</sup>Dans ce document, le terme « collocation » est préféré à « pseudospectral » pour éviter des confusions : dans la littérature, le terme « pseudospectral » est aussi utilisé pour désigner des méthodes spectrales où seul le calcul des gradients est effectué dans l'espace spectral.



**Figure 2.1** : Décomposition en tranches du domaine de calcul pour la parallélisation des opérations dans l'espace physique ; le code `POUSSINS`, utilisé dans ces travaux, emploie la décomposition selon  $x$  (b).

Dans le contexte des cas tests 2D impliquant des parois, et plus spécifiquement pour la simulation de RTI comme exposé dans la section 2.4.1, un schéma spectral de collocation Chebyshev est appliqué dans la direction perpendiculaire aux parois.

### 2.1.1 Calculs spectraux via FFT

Un avantage clé des méthodes spectrales est que dans l'espace de Fourier, les dérivées peuvent être calculées simplement en multipliant les coefficients de Fourier par les nombres d'onde correspondants via

$$\widehat{\varphi'(x)} = \mathcal{F}(\varphi'(x)) = ik\hat{\varphi}(k), \quad (2.1)$$

où  $\mathcal{F}(\cdot)$  et  $\hat{\cdot}$  représentent tous deux la transformée de Fourier et  $k$  est le nombre d'onde. Au sein des simulations numériques, la transformée de Fourier d'un champ  $\varphi$  est approchée à l'aide de la Discrete Fourier Transform (DFT, *Transformée de Fourier Discrète*)

$$\mathcal{F}(\varphi_k) = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \varphi_n \cdot \exp\left(-\frac{i2\pi}{N}kn\right) \quad (2.2)$$

du champ discrétisé  $\{\varphi_n\} = \varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_{N-1}$ .

Suite à la contribution pionnière de COOLEY et TUKEY [17], de nombreux algorithmes basés sur leur méthode révolutionnaire de Fast Fourier Transform (FFT, *Transformation de Fourier Rapide*) ont été développés, améliorant progressivement l'efficacité du calcul des DFT. L'une des implémentations les plus célèbres est la Fastest Fourier Transform in the West (FFTW), développée au MIT par FRIGO et JOHNSON [29]. Notre code DNS, `POUSSINS`, utilise cette bibliothèque pour effectuer le calcul des FFT. Cependant, il n'utilise pas l'Interface de Programmation d'Applications (IPA) parallèle MPI fournie par la bibliothèque. À la place, il combine l'IPA séquentielle avec sa propre parallélisation du domaine.

Le domaine est divisé dans l'espace physique en utilisant une décomposition en tranches suivant l'axe  $x$  (voir figure 2.1). Les transformations de Fourier sont alors effectuées dans les directions perpendiculaires  $y$  et  $z$ . Le champ est ensuite recomposé dans la direction  $x$  et décomposé dans la direction  $z$ . Quelques essais numériques ont montré que cette implémentation est légèrement plus efficace que l'IPA parallèle de FFTW. Elle est donc adoptée par la suite.

L'utilisation d'algorithmes de FFT performants permet d'utiliser exclusivement les transformations de Fourier pour les calculs différentiels, tels que les dérivées, les laplaciens et les intégrations. Toutes les autres opérations sont réalisées directement dans l'espace physique. Cette approche, parfois appelée « pseudospectrale », permet de mettre en œuvre des opérations non linéaires dans l'espace physique tout en préservant une précision spectrale. De plus, elle offre un accès constant aux champs physiques tout au long de la simulation.

Enfin, pour corriger les erreurs d'aliasing, les champs sont filtrés selon la méthode de phase-shifting proposée par ORSZAG [59], qui ne garde que les modes de Fourier vérifiant  $k < k_{\max} = 2N/3$ , où  $N$  est le nombre de points dans chaque direction cartésienne de l'espace physique.



### 2.1.2 Projection pour la résolution du problème à densité variable

Les écoulements incompressibles, qu'ils impliquent un champ de densité constant ou variable, présentent la caractéristique notable d'avoir un champ de vitesse à divergence nulle. Pour les écoulements à composantes multiples, où différentes représentations du champ de vitesse peuvent être utilisées (comme discuté dans la section 1.2) il est impératif de s'assurer que la vitesse moyennée par le volume satisfait  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ . Cela revêt une grande importance, car cela garantit la conservation de la masse

$$\frac{1}{M} \frac{dM}{dt} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \, dV, \quad M = \int_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) \, dV. \quad (2.3)$$

Pour garantir l'incompressibilité, une technique de projection basée sur les travaux de BELL et MARCUS [5], ALMGREN et al. [1] et CALGARO, CREUSÉ et GOUDON [11] est utilisée. Cette dernière est expliquée en détail dans DI PIERRO et ABID [21] et REYNIER et al. [67]. Considérons un avancement en temps d'un pas  $\delta t$  du champ de vitesse  $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}(\mathbf{x}, n\delta t)$  jusqu'au champ  $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, (n+1)\delta t)$ . La technique de projection implique les étapes suivantes :

1. Calculer un champ de vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$ , avec une divergence non nulle, à partir d'une équation de quantité de mouvement modifiée (équation (1.27a)) dans laquelle le terme de pression est exclu.
2. Calculer un champ de pression à partir du champ de vitesse intermédiaire, dont le gradient permet de corriger  $\mathbf{u}^*$  en le rendant à divergence nulle.
3. Calculer le champ de vitesse final (à divergence nulle) en utilisant le champ de pression et de vitesse intermédiaire.

Cette dernière étape est appelée *étape de projection*, au cours de laquelle  $\mathbf{u}^*$  est projeté dans l'espace des vecteurs à divergence nulle. Dans le cas des écoulements à densité constante, la relation entre ces deux vecteurs est donnée par

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{P}(\mathbf{u}^*) - \nabla p^{n+1}, \quad \nabla^2 p^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (2.4)$$

où la pression agit comme un multiplicateur de Lagrange, et l'opérateur de projection  $\mathbf{P}$  est défini par

$$\mathbf{P} = \text{Id} - \nabla(\nabla^2)^{-1}\nabla \cdot, \quad (2.5)$$

où  $(\nabla^2)^{-1}$  est l'inverse de l'opérateur laplacien tridimensionnel. Cependant, lorsque l'on introduit des variations de densité, l'équation (2.4) devient invalide. Des techniques telles que la compression artificielle proposée par GUERMOND et SALGADO [36] peuvent être utilisées comme solutions de contournement du problème. Néanmoins, ces méthodes introduisent des paramètres libres qui peuvent conduire à des instabilités numériques [21]. Pour garantir la convergence de la pression et imposer l'incompressibilité, l'équation de pression à densité variable est alors résolue sans ajouter de modèle en introduisant l'opérateur elliptique

$$\mathbf{L}_{\rho}(\rho^m, \phi) = \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho^m} \nabla \phi \right) = \frac{1}{\delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*, \quad (2.6)$$

où  $\rho^m$  est un champ de densité intermédiaire (dépendant du schéma d'intégration) et le champ scalaire  $\phi$  est la pression utilisée pour la projection du champ de vitesse :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{P}_{\rho}(\rho^m, \mathbf{u}^*) = \mathbf{u}^* - \delta t \frac{\nabla \phi}{\rho^m}. \quad (2.7)$$

En injectant l'équation (2.7) dans l'équation de la quantité de mouvement modifiée, et en la comparant avec le schéma défini par la méthode d'intégration, on peut obtenir l'expression de la pression totale. Comme mentionné par DI PIERRO et ABID [21], l'opérateur de projection  $\mathbf{P}_{\rho}$  est un opérateur de projection exact. En effet,

$$\mathbf{P}_{\rho} = \text{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla \mathbf{L}_{\rho}^{-1} \nabla \cdot, \quad (2.8)$$

et donc, pour tout champ vectoriel  $\psi$  à divergence nulle et tout champ vectoriel  $\varphi$  quelconque,

$$\mathbf{P}_\rho(\psi) = \psi, \quad (\mathbf{P}_\rho \circ \mathbf{P}_\rho)(\varphi) = \mathbf{P}_\rho(\varphi). \quad (2.9)$$

Le détail des calculs est le suivant :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{P}_\rho(\varphi) &= \nabla \cdot (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) \varphi \\ &= \nabla \cdot \varphi - \underbrace{\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \varphi}_{L_\rho L_\rho^{-1}} \\ &= \nabla \cdot \varphi - \nabla \cdot \varphi = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_\rho(\psi) &= (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) \psi \\ &= \psi - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \underbrace{\nabla \cdot \psi}_{=0} \\ &= \psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}_\rho \circ \mathbf{P}_\rho)\varphi &= (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) \varphi \\ &= (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) \varphi - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot (\mathbf{Id} - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot) \varphi \\ &= \mathbf{P}_\rho(\varphi) - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \varphi + \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \underbrace{\frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \varphi}_{L_\rho L_\rho^{-1}} \\ &= \mathbf{P}_\rho(\varphi) - \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \varphi + \frac{1}{\rho} \nabla L_\rho^{-1} \nabla \cdot \varphi \\ &= \mathbf{P}_\rho(\varphi) \end{aligned}$$

Pour conclure cette section, cette technique de projection permet la réalisation de DNS d'écoulements incompressibles à densité variable. Elle est utilisée par les méthodes d'intégration temporelle discutées dans la section suivante. Pour plus de détails sur la technique de projection, on peut se référer aux travaux de DI PIERRO et ABID [21] et DI PIERRO [20, section 2.4.2], où des explications détaillées sont fournies.

## 2.2 Schémas d'avancement temporel

Les équations du mouvement sont avancées en temps dans l'espace physique, tandis que, comme expliqués précédemment, les calculs de gradients sont effectués dans l'espace spectral. Généralement, les simulations turbulentes utilisent des schémas explicites d'ordre élevés (supérieurs à 2, voir par exemple les articles de ISHIHARA et al. [41] et YOKOKAWA et al. [81]) pour capturer la dynamique des structures aux plus petites échelles de l'écoulement. Cependant, l'introduction des effets de masse ajoute des termes croisés dans l'équation de la quantité de mouvement et nécessite l'avancement d'une équation supplémentaire. Ces termes supplémentaires augmentent de façon significative le coût en calculs de l'intégration temporelle, ce qui limite donc l'utilisabilité des méthodes d'ordres élevés ( $> 2$ ). De plus, la combinaison de la diffusion de masse avec les effets d'advection peut conduire à la génération de profils et de gradients de densité abrupts, mettant à l'épreuve la stabilité des méthodes explicites [62]. Pour résoudre ces problèmes, des essais utilisant différents schémas explicites et semi-implicites sont réalisés.

Dans cette section, les différentes procédures d'intégration temporelle explorées sont présentées. Les schémas appartiennent à la famille de Runge–Kutta, dont la théorie générale est brièvement présentée dans l'annexe B. L'ordre de précision des schémas est vérifié en calculant l'erreur par rapport à la solution pseudoexacte des équations à densité variable, définie par les équations (1.32). Chaque schéma est testé sur des simulations à densité constante à haut nombre de Reynolds avec

$$Re = 1000, \quad s = 1, \quad Sc = 1,$$

pour évaluer sa convergence dans un contexte idéal. Ensuite, ils sont testés sur des simulations à densité variable à bas Reynolds avec

$$Re = 1, \quad s = 4, \quad Sc = 1,$$

afin d'étudier leurs performances dans des conditions critiques.

Les sections 2.2.1 à 2.2.4 donnent une vue d'ensemble des schémas explicites testés. Les sections 2.2.5 à 2.2.6 se concentrent sur les méthodes semi-implicites, avec la section 2.2.5 offrant une explication du traitement semi-implicite. Enfin, la section 2.2.7 présente une conclusion concernant les méthodes numériques choisies pour les simulations. Au sein de ces sections, les schémas sont appliqués à la solution pseudoexacte des équations à densité variable, détaillée dans les équations (1.32). Les simulations sont réalisées sur un maillage avec  $128^3$  points et employant un schéma spectral Galerkin de Fourier. Les erreurs temporelles sont quantifiées selon les équations (1.33).

### 2.2.1 Runge–Kutta 2

L'implémentation de schémas explicites ne pose pas de défi particulier. Le seul aspect critique est le choix du schéma de mise à jour de la pression, qui joue un rôle crucial dans l'obtention de l'ordre de convergence souhaité pour le champ de pression [9].

Afin de simplifier le développement des schémas d'avancement temporels explicites, les équations du problème sont réécrites sous la forme

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{f}(\rho, \mathbf{u}) - \rho^{-1} \nabla p, \quad (2.10a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = g(\rho, \mathbf{u}), \quad (2.10b)$$

où  $\mathbf{f} - \rho^{-1} \nabla p$  et  $g$  représentent les seconds membres des équations (1.27a) et (1.27b), respectivement. En utilisant cette formulation, un schéma explicite Runge–Kutta 2 (RK2) peut s'écrire à partir du tableau de Butcher

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ \hline & 0 & 1 \end{array} \quad (2.11)$$

comme

$$j_1 = g(\mathbf{u}^n, \rho^n), \quad (2.12a)$$

$$\mathbf{k}_1^* = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n, \rho^n), \quad (2.12b)$$

$$p_1 = \mathbb{L}_\rho^{-1}(\mathbf{k}_1^*, \rho^n), \quad (2.12c)$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1^* - \nabla p_1 / \rho^n, \quad (2.12d)$$

$$j_2 = g(\mathbf{u}^n + \delta t \mathbf{k}_1, \rho^n + \delta t j_1), \quad (2.12e)$$

$$\mathbf{k}_2^* = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n + \delta t \mathbf{k}_1, \rho^n + \delta t j_1), \quad (2.12f)$$

$$p_2 = \mathbb{L}_\rho^{-1}(\mathbf{k}_2^*, \rho^n + \delta t j_1), \quad (2.12g)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_2^* - \nabla p_2 / (\rho^n + \delta t j_1), \quad (2.12h)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{2}\delta t(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2), \quad (2.12i)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \frac{1}{2}\delta t(j_1 + j_2), \quad (2.12j)$$

$$p^{n+1} = \frac{1}{2}\delta t(p_1 + p_2). \quad (2.12k)$$

Le calcul des seconds membres s'effectue lors d'une étape de prédiction et d'une étape de correction, incorporant la sous-étape de projection discutée précédemment. L'inversion de l'équation de pression, qui est effectuée deux fois ici, reste inchangée quelle que soit la méthode d'avancement en temps et est décrite plus en détail dans la section 2.3. Les équations sont ensuite intégrées à l'aide d'une approche totalement explicite et la pression est évaluée en utilisant le même schéma pour maintenir une précision de second ordre [9]. Une autre approche consisterait à calculer le champ de pression à partir de la vitesse finale  $\mathbf{u}^{n+1}$ . Cependant, d'après nos essais, cette alternative ne permet pas d'obtenir une précision de second ordre pour les simulations à faible nombre de Reynolds ( $< 200$ ).

Les figures 2.2(a) et 2.3(a) pages 33 et 34 illustrent les courbes de convergence de ce schéma, pour des simulations à densité constante et à densité variable, respectivement. On peut observer que dans les deux cas, une précision de second ordre est atteinte pour tous les champs de l'écoulement.

### 2.2.2 Runge–Kutta 3

Similairement au RK2, l'avancement en temps Runge–Kutta 3 (RK3) explicite implique une sous-étape supplémentaire, ce qui permet d'atteindre une précision d'un ordre supérieur. Différents jeux de coefficients sont disponibles. Ici le plus communément employé est utilisé, et est représenté dans le tableau de Butcher ci-dessous.

$$\begin{array}{c|ccc}
 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\
 1 & -1 & 2 & 0 \\
 \hline
 & 1/6 & 2/3 & 1/6
 \end{array} \quad (2.13)$$

La mise en œuvre ressemble beaucoup à celle du RK2, avec l'ajout d'une étape supplémentaire et une procédure similaire de mise à jour de la pression :

$$j_1 = g(\mathbf{u}^n, \rho^n), \quad (2.14a)$$

$$\mathbf{k}_1^* = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n, \rho^n), \quad (2.14b)$$

$$p_1 = L_\rho^{-1}(\mathbf{k}_1^*, \rho^n), \quad (2.14c)$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1^* - \nabla p_1 / \rho^n, \quad (2.14d)$$

$$j_2 = g(\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \delta t \mathbf{k}_1, \rho^n + 1/2 \delta t j_1), \quad (2.14e)$$

$$\mathbf{k}_2^* = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \delta t \mathbf{k}_1, \rho^n + 1/2 \delta t j_1), \quad (2.14f)$$

$$p_2 = L_\rho^{-1}(\rho^n + \frac{1}{2} \delta t j_1, \mathbf{k}_2^*), \quad (2.14g)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_2^* - \nabla p_2 / (\rho^n + \frac{1}{2} \delta t j_1), \quad (2.14h)$$

$$j_3 = g(\mathbf{u}^n + (2\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \delta t, \rho^n + \delta t(2j_2 - j_1)), \quad (2.14i)$$

$$\mathbf{k}_3^* = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n + (2\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \delta t, \rho^n + \delta t(2j_2 - j_1)), \quad (2.14j)$$

$$p_3 = L_\rho^{-1}(\rho^n + (2j_2 - j_1) \delta t, \mathbf{k}_3^*), \quad (2.14k)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_3^* - \nabla p_3 / (\rho^n + \delta t(2j_2 - j_1)), \quad (2.14l)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \frac{1}{6} \delta t (j_1 + 4j_2 + j_3), \quad (2.14m)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{6} \delta t (\mathbf{k}_1 + 4\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3), \quad (2.14n)$$

$$p^{n+1} = \frac{1}{6} \delta t (p_1 + 4p_2 + p_3). \quad (2.14o)$$

Les figures 2.2(b) et 2.3(b) pages 33 et 34 illustrent les courbes de convergence de ce schéma, pour des simulations à densité constante et à densité variable, respectivement. Pour les simulations à densité constante, un troisième ordre est atteint pour tous les champs, tandis que la pression est limitée au second ordre dans le cas à densité variable.

### 2.2.3 Strong-Stability Preserving Runge–Kutta 3

GOTTLIEB, SHU et TADMOR [33] proposent une collection de méthodes Runge–Kutta, connues sous le nom de Strong-Stability Preserving (SSP), qui préservent une forte propriété de stabilité. Ces méthodes ont démontré leur efficacité en présentant une meilleure convergence que les implémentations classiques pour les problèmes hyperboliques discontinus, sans coûts de calcul supplémentaire. Cette amélioration de stabilité pourrait être avantageuse dans notre cas pour capturer des profils raides tout en conservant une approche explicite. Le tableau de Butcher pour le Strong-Stability Preserving Runge–Kutta 3 (SSPRK3) est le suivant :

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 3/4 & 0 & 3/4 & 0 \\ \hline & 2/9 & 1/3 & 4/9 \end{array} \quad (2.15)$$

L'implémentation de cette variante est identique au RK3 explicite classique, avec seulement des variations dans les coefficients.

Les courbes de convergence de cette méthode sont tracées dans les figures 2.2(c) et 2.3(c) pages 33 et 34, pour les essais à densité constante et à densité variable, respectivement. Dans le cas à densité constante, tous les champs d'écoulement convergent au troisième ordre. Dans le cas à densité inhomogène, de manière similaire au RK3, il atteint une précision de troisième ordre, sauf pour la pression,

qui reste au deuxième ordre. Ainsi, il apparaît que cette version n’offre aucun avantage par rapport à la version standard, pour nos simulations.

### 2.2.4 Runge–Kutta 4

Dans la continuité des méthodes précédentes, la méthode explicite Runge–Kutta 4 (RK4) effectue un avancement temporel en quatre sous-étapes. Le tableau de Butcher résumant les coefficients est présenté ci-dessous.

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\
 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\
 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 \hline
 & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6
 \end{array} \tag{2.16}$$

Comme pour les autres méthodes explicites, l’implémentation suit un schéma similaire. Elle comprend une étape supplémentaire et la pression est calculée selon le modèle du schéma. L’intégration finale s’écrit

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \frac{1}{6}\delta t(j_1 + 2(j_2 + j_3) + j_4), \tag{2.17a}$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \frac{1}{6}\delta t(\mathbf{k}_1 + 2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) + \mathbf{k}_4), \tag{2.17b}$$

$$p^{n+1} = \frac{1}{6}\delta t(p_1 + 2(p_2 + p_3) + p_4). \tag{2.17c}$$

Les courbes de convergence de cette méthode sont présentées dans les figures 2.2(d) et figure 2.3(d) pages 33 et 34, pour les essais à densité constante et variable, respectivement. Comme précédemment, le quatrième ordre anticipé est obtenu pour tous les champs à densité constante, tandis que la pression est limitée au deuxième ordre dans les simulations à densité variable. Par conséquent, il semble que l’obtention d’un ordre de pression supérieur à 2 en utilisant des méthodes explicites ne soit pas possible avec cette approche. Cette limitation est probablement attribuée à l’inversion de l’opérateur de pression, qui impose des contraintes sur la précision des schémas d’intégration.

### 2.2.5 Runge–Kutta 2/Crank–Nicholson

Les méthodes explicites mentionnées précédemment sont généralement communément utilisées pour les DNS de turbulence isotrope à densité constante. Cependant, leur marge de stabilité est limitée [62], ce qui peut nécessiter l’utilisation de petits pas de temps d’intégration  $\delta t$ , affectant négativement les performances. Les simulations d’écoulements turbulents à densité variable peuvent introduire des structures (principalement dues aux gradients de densité) mettant à l’épreuve les limites de stabilité du schéma numérique. Afin de garantir la convergence numérique et d’optimiser le temps de calcul, des méthodes semi-implicites sont étudiées, afin d’étendre la plage de stabilité des intégrateurs temporels.

Dans un scénario idéal, un traitement entièrement implicite des équations serait utilisé, offrant des gains de stabilité substantiels. Cependant, dans la pratique, cette approche présente deux inconvénients : (1) pour les problèmes non linéaires, travailler de manière implicite est difficile, voire impossible ; (2) passer à une approche implicite entraîne des coûts de calcul accrus. En suivant les travaux de BELL et MARCUS [5], BROWN, CORTEZ et MINION [9] et DI PIERRO et ABID [21], une approche intermédiaire « semi-implicite » est adoptée où seuls les termes critiques pour la stabilité sont traités de manière implicite. Dans notre cas, les termes qui mettent en jeu les limites de stabilité sont les termes de diffusion. Plus précisément, le terme  $\zeta(\mathbf{u}, \rho)$  dans l’équation de la quantité de mouvement (1.27a), qui tient compte de la diffusion de masse et visqueuse. Par conséquent, les termes de diffusion  $\zeta(\mathbf{u}, \rho)$  et  $(Re Sc)^{-1}\nabla^2\rho$  sont traités de manière implicite à l’aide d’une méthode Crank–Nicholson (CN) à deux étapes.

Pour illustrer cela, considérons une équation différentielle générale

$$\partial_t\varphi = N\varphi + L\varphi = H\varphi, \tag{2.18}$$

où  $N$  représente l'opérateur non linéaire et  $L$  représente l'opérateur linéaire. Lorsque le schéma CN est appliqué à l'ensemble de l'équation, l'avancement dans le temps s'écrit comme

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \frac{1}{2}\delta t(H\varphi^{n+1} + H\varphi^n), \quad (2.19)$$

et donc, l'opérateur  $H$  associé au second membre total doit être inversé pour calculer

$$\varphi^{n+1} = (\text{Id} - \frac{1}{2}\delta t H)^{-1} (\text{Id} + \frac{1}{2}\delta t H) \varphi^n. \quad (2.20)$$

Dans une approche semi-implicite, les composantes linéaires et non linéaires sont séparées et le schéma CN est appliqué uniquement au terme linéaire. Un autre schéma est utilisé pour le terme non linéaire  $N$  et l'intégration temporelle est obtenue avec

$$\varphi^{n+1} = (\text{Id} - \frac{1}{2}\delta t H)^{-1} ((\text{Id} + \frac{1}{2}\delta t L)\varphi^n + (N\varphi)^n). \quad (2.21)$$

Dans les cas d'écoles, l'inversion de l'opérateur linéaire n'est pas problématique et peut parfois être réalisée par une simple division terme à terme. Cependant, dans la pratique, cette inversion rend les méthodes implicites et semi-implicites beaucoup plus complexes à mettre en œuvre par rapport aux méthodes explicites.

Suivant cette méthodologie, la forme générale de l'intégration semi-implicite pour les VDINSE s'écrit

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{V}_{\rho^-}^{-1}(\rho^m, (\mathbf{V}_{\rho^+}(\rho^n, \mathbf{u}^n) + ((\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u})^{n+1} + (\rho^{-1}\nabla p)^{n+1/2})), \quad (2.22a)$$

$$\rho^{n+1} = D_-^{-1}(D_+(\rho^n) + ((\mathbf{u} \cdot \nabla)\rho)^{n+1/2}), \quad (2.22b)$$

où  $(\varphi)^{n+1/2}$  est l'estimation de  $\varphi$  à l'ordre deux. Les termes d'advection  $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$  et  $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\rho$ , qui ne posent pas de problèmes de stabilité (et sont non linéaires dans le cas de l'équation de quantité de mouvement) sont évalués explicitement. Les opérateurs  $\mathbf{V}_{\rho^\pm}$  et  $D_\pm$  représentent les termes de diffusion avec un traitement CN implicite, et sont définis comme

$$\mathbf{V}_{\rho^\pm}(\rho^m, \mathbf{u}^n) = \left( \text{Id} \pm \frac{\delta t}{2 Re \rho^m} \left( \nabla^2 + \frac{1}{Sc} (\nabla^2 \rho^m + \nabla \rho^m \cdot \nabla) \right) \right) \mathbf{u}^n, \quad (2.23)$$

et

$$D_\pm \rho^n = \left( \text{Id} \pm \frac{\delta t}{2 Re Sc} \nabla^2 \right) \rho^n. \quad (2.24)$$

Le schéma semi-implicite Runge–Kutta 2/Crank–Nicholson (RK2/CN) permet un traitement implicite CN des termes linéaires, couplé avec une intégration basée sur le RK2. Pour notre modèle réduit (2.18), l'intégration est réalisée via

$$\varphi_1 = \varphi^n + \alpha \delta t (N\varphi^n + \frac{1}{2}L\varphi^n + \frac{1}{2}L\varphi_1), \quad (2.25a)$$

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \frac{\delta t}{2\alpha} ((2\alpha - 1)N\varphi^n + N\varphi_1 + \frac{1}{2}L\varphi_1 + \frac{1}{2}L\varphi^{n+1}), \quad (2.25b)$$

où le paramètre  $\alpha$  est arbitraire et communément fixé à  $\alpha = 1$  afin d'imiter le comportement explicite. Cette méthode ainsi que les autres méthodes implicites Runge-Kutta d'ordres plus élevés, sont expliquées en détail dans PEYRET [62, section 4.5.1(c)]. Combiné à la technique de projection décrite dans la

section 2.1.2, l'implémentation de cette méthode d'avancement temporel se développe comme

$$j_1 = g(\mathbf{u}^n, \rho^n), \quad (2.26a)$$

$$\rho_1 = D^{-1}(\rho^n + \delta t j_1), \quad (2.26b)$$

$$\rho'_1 = \frac{1}{2}(\rho^n + \rho_1), \quad (2.26c)$$

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{N} \mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \mathbf{V}_{\rho^+}(\rho'_1, \mathbf{u}^n) - \frac{\nabla p^n}{\rho'_1}, \quad (2.26d)$$

$$\mathbf{u}_1^* = \mathbf{V}_{\rho^-}^{-1}(\rho'_1, \mathbf{u}^n + \delta t \mathbf{k}_1), \quad (2.26e)$$

$$\phi_1 = L_\rho(\rho'_1, \mathbf{u}_1^*), \quad (2.26f)$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1^* - \delta t \frac{\nabla \phi_1}{\rho'_1}, \quad (2.26g)$$

$$j_2 = g(\mathbf{u}_1, \rho_1), \quad (2.26h)$$

$$\rho^{n+1} = D^{-1}(\rho^n + \frac{1}{2} \delta t (j_1 + j_2)), \quad (2.26i)$$

$$\rho'_2 = \frac{1}{2}(\rho_1 + \rho^{n+1}), \quad (2.26j)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{N} \mathbf{u}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{V}_{\rho^+}(\rho'_2, \mathbf{u}_1) - \frac{\nabla p^n}{\rho'_2}, \quad (2.26k)$$

$$\mathbf{u}_2^* = \mathbf{V}_{\rho^-}^{-1}(\rho'_2, \mathbf{u}^n + \frac{1}{2} \delta t (\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)), \quad (2.26l)$$

$$\phi_2 = L_\rho(\rho'_2, \mathbf{u}_2^*), \quad (2.26m)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_2^* - \delta t \frac{\nabla \phi_2}{\rho'_2}, \quad (2.26n)$$

$$\nabla p^{n+1} = \nabla p^n + \delta t \nabla (\phi_1 + \phi_2) - \frac{1}{2} \delta t \zeta(\rho'_2, \nabla \phi / \rho'_2), \quad (2.26o)$$

où  $\mathbf{N} \mathbf{u}^n \equiv (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n$ .

Les courbes de convergence de cette méthode sont présentées dans les figures 2.2(e) et 2.3(e) pages 33 et 34, pour des simulations à densité constante et variable, respectivement. On note qu'une précision de second ordre est obtenue pour tous les champs de l'écoulement dans les deux scénarios. En outre, on peut observer que la version semi-implicite permet une réduction du pas de temps jusqu'à  $\delta t = 10^{-1}$ , qui n'est pas atteignable avec les versions explicites, indiquant une amélioration de stabilité.

### 2.2.6 Runge–Kutta 3/Crank–Nicholson

Dans le but d'obtenir un ordre de précision plus élevé pour la pression, la méthode Runge–Kutta 3/Crank–Nicholson (RK3/CN) recommandée par PEYRET [62] et proposée par ZANG et HUSSAINI [82] est maintenant explorée. Son schéma d'intégration s'écrit

$$\varphi_0 = \varphi^n, \quad (2.27a)$$

$$Q_j = A_j Q_{j-1} + \delta t N \varphi_{j-1}, \quad (2.27b)$$

$$\varphi_j = \varphi_{j-1} + B_j Q_j + B'_j \delta t (L \varphi_{j-1} + L \varphi_j), \quad j = 1, \dots, 3, \quad (2.27c)$$

$$\varphi^{n+1} = \varphi_3, \quad (2.27d)$$



avec

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, & A_2 &= -\frac{5}{9}, & A_3 &= -\frac{153}{128}, \\ B_1 &= \frac{1}{3}, & B_2 &= \frac{15}{16}, & B_3 &= \frac{8}{15}, \\ B'_1 &= \frac{1}{6}, & B'_2 &= \frac{5}{24}, & B'_3 &= \frac{1}{8}. \end{aligned}$$

Similairement au RK2/CN, elle combine l'intégration en trois sous-étapes du RK3 avec le traitement semi-implicite du schéma CN. Les auteurs suggèrent que théoriquement, l'inclusion de termes implicites réduit la précision au second ordre. Cependant, pour des simulations peu visqueuses, il est possible d'atteindre une précision de troisième ordre.

Les courbes de convergence de cette méthode sont présentées dans les figures 2.2(f) et 2.3(f) pages 33 et 34, pour les scénarios à densité constante et variable, respectivement. Comme prévu par la théorie, une précision de troisième ordre est obtenue pour les champs à densité constante. Néanmoins, dans le cas avec variations de densité, une précision d'ordre deux est obtenue. Des essais ont été effectués pour des écoulements à densité variable avec un nombre de Reynolds de 1000. Dans ces scénarios, une précision de troisième ordre est atteinte pour les champs de vitesse et de densité, tandis que la pression conserve un comportement d'ordre deux.

### 2.2.7 Conclusions sur les méthodes d'intégration temporelles

L'exploration de divers schémas d'avancement en temps a démontré que, lorsqu'il s'agit d'écoulements avec gradients de densité, la combinaison de méthodes d'ordres élevés avec la technique de projection (qui implique l'inversion de l'opérateur par des méthodes itératives<sup>2</sup>) restreint la précision du champ de pression à un second ordre. Le traitement semi-implicite des équations n'a pas non plus permis d'améliorer la précision de la pression. Il semble que cette approche limite à une précision d'ordre deux. D'un autre côté, les schémas semi-implicites offrent des avantages en terme de stabilité qui sont désirables pour les simulations impliquant des champs de densité inhomogènes. Cependant, la résolution est restreinte à un ordre deux pour tous les champs étant donné que le RK3/CN a une précision de second ordre lorsqu'il est confronté à des gradients raides.

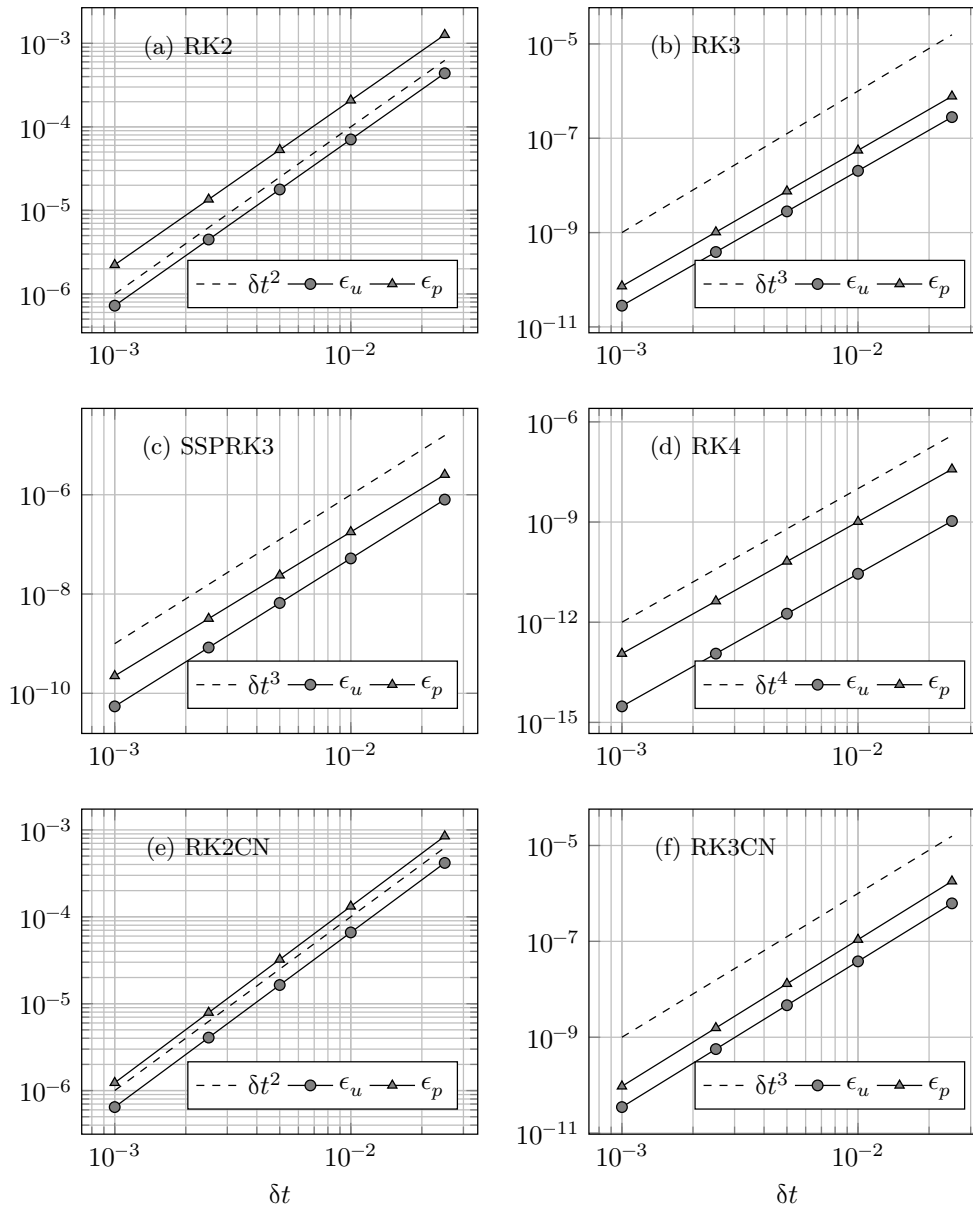
Il est essentiel de garder à l'esprit que le cas test de la solution pseudoexacte produit des structures moins abruptes que celles observées dans les écoulements turbulents. En conséquence, la méthode RK2/CN est choisie pour les simulations à densité variable, car elle permet d'améliorer la stabilité tout en garantissant une précision à l'ordre deux pour la pression. Dans les cas où il est nécessaire de générer des champs à densité constante (par exemple, pour les conditions initiales turbulentes), le schéma RK4 est employé pour assurer une résolution optimale de toutes les échelles de l'écoulement.

## 2.3 Préconditionnement des opérateurs à densité variable

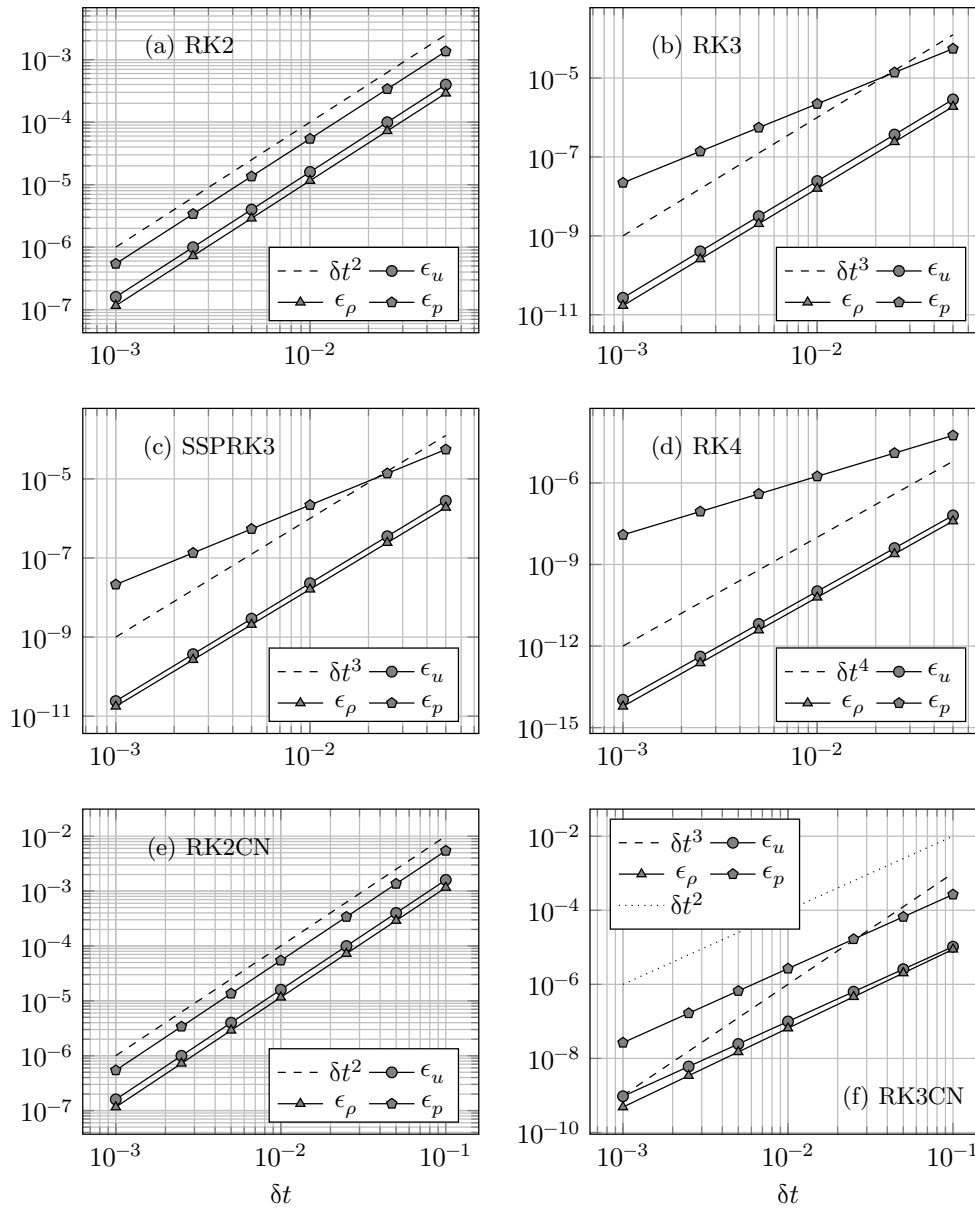
Le traitement semi-implicite des équations pour l'intégration temporelle implique l'inversion des opérateurs de pression et de diffusion. Comme observé dans l'implémentation du RK2/CN (équations (2.26)) chaque opérateur est inversé deux fois. Ces inversions doivent remplir deux conditions : préserver la précision d'ordre deux du schéma et être efficaces d'un point de vue calcul pour minimiser le temps d'intégration.

La solution d'une équation elliptique avec coefficients constants discrétisée avec une approximation spectrale peut être calculée efficacement et précisément en utilisant des algorithmes qui exploitent les propriétés de la base spectrale. Ces algorithmes sont appropriés pour l'inversion de l'opérateur de diffusion de masse  $D_{\pm}$ . Toutefois, le problème se pose lors de la résolution des VDINSE en raison de la nature plus complexe de l'équation de pression et des termes de diffusion de quantité de mouvement. En particulier, lorsque ces problèmes elliptiques avec coefficients variables, tels que  $\rho^{-1}$ , sont discrétisés

<sup>2</sup>les méthodes itératives sont discutées dans la section suivante (2.3)



**Figure 2.2 :** Erreurs temporelles à  $t = \pi/4$  des schémas d'avancement temporel Runge–Kutta versus le pas de temps  $\delta t$  durant des simulations à *densité constante* :  $Re = 1000$ ,  $s = 1$ ,  $Sc = 1$ . Les erreurs sont calculées par rapport à la solution pseudoexacte des VDINSE (équations (1.32) page 13). (a), (b), (c) et (d) présentent les erreurs issues d'avancements temporels pleinement explicites utilisant des méthodes RK2, RK3, SSPRK3 et RK4, respectivement. (e) et (f) décrivent les erreurs issues d'avancements temporels semi-implicites utilisant des méthodes RK2/CN et RK3/CN, respectivement. Les simulations sont réalisées avec  $N = 128^3$  points de discrétisation.



**Figure 2.3** : Erreurs temporelles à  $t = \pi/4$  des schémas d’avancement temporel Runge–Kutta versus le pas de temps  $\delta t$  durant des simulations à *densité variable* :  $Re = 1$ ,  $s = 4$ ,  $Sc = 1$ . Les erreurs sont calculées par rapport à la solution pseudoexacte des VDINSE (équations (1.32) page 13). (a), (b), (c) et (d) présentent les erreurs issues d’avancements temporels pleinement explicites utilisant des méthodes RK2, RK3, SSPRK3 et RK4, respectivement. (e) et (f) décrivent les erreurs issues d’avancements temporels semi-implicites utilisant des méthodes RK2/CN et RK3/CN, respectivement. Les simulations sont réalisées avec  $N = 128^3$  points de discrétisation.

avec des méthodes spectrales, ils conduisent à des matrices complètes très mal conditionnées, rendant les solveurs spectraux directs inefficaces.

CANUTO et al. [13] et PEYRET [62] soulignent que des systèmes tels que l'équation (2.6) doivent être résolus avec des méthodes itératives. Sachant que l'efficacité et la précision de l'inversion d'un opérateur sont fortement corrélées avec la qualité de son conditionnement, le choix d'un préconditionnement efficace est crucial pour accélérer la convergence et maximiser la précision du solveur itératif.

Étant donné que les variations de densité considérées ici sont suffisamment lisses pour être projetées avec précision sur une base spectrale, les inverses des opérateurs à densité constante sont utilisés comme préconditionneurs. En d'autres termes, l'inverse de

$$L_\rho(\rho = 1, \phi) = \nabla^2 \phi \quad (2.28)$$

est utilisé pour préconditionner l'opérateur de pression à densité variable

$$L_\rho(\rho^m, \phi) = \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho^m} \nabla \phi \right) \quad (2.29)$$

lors de la projection de la  $n$ -ième intégration temporelle ( $t = n\delta t$ ) et où  $m$  est un pas de temps intermédiaire pour le champ de densité choisi pour satisfaire la consistance des schémas. Pour l'opérateur de diffusion, l'inverse de

$$\mathbf{V}_-(\mathbf{u}) \equiv \mathbf{V}_{\rho^-}(\rho = 1, \mathbf{u}) = (1 - a\nabla^2) \mathbf{u} \quad (2.30a)$$

où  $a = \frac{1}{2}\delta t / Re$  est utilisé pour préconditionner l'opérateur semi-implicite à densité variable

$$\mathbf{V}_{\rho^-}(\rho, \mathbf{u}) = \left( \mathbf{Id} - a \left( \nabla^2 + \frac{1}{Sc} (\nabla^2 \rho + \nabla \rho \cdot \nabla) \right) \right) \mathbf{u}. \quad (2.30b)$$

Puisque dans cette section seul l'opérateur  $\mathbf{V}_{\rho^-}$  (et non  $\mathbf{V}_{\rho^+}$ , voir équation (2.23)) est discuté, la notation est simplifiée par souci de lisibilité :  $\mathbf{V} \equiv \mathbf{V}_-$  et  $\mathbf{V}_\rho \equiv \mathbf{V}_{\rho^-}$ .

L'efficacité du préconditionnement est présentée pour l'opérateur de diffusion (équation (2.30b)) dans la section 2.3.1, et pour l'opérateur de pression (équation (2.6)) dans la section 2.3.2. Les matrices associées aux opérateurs n'étant jamais construites dans le cadre de DNS, des essais illustratifs sont effectués sur des cas unidimensionnels utilisant un schéma spectral Fourier–Fourier (Galerkin). Ces essais sont représentatifs de l'implémentation utilisée dans les solveurs DNS, où les opérateurs sont appliqués sur des vecteurs. Pour ces essais numériques, un profil classique de type « top-hat »

$$\rho(x) = 1 + \frac{s-1}{2} \left( \tanh\left(\frac{x+x_0}{d}\right) - \tanh\left(\frac{x-x_0}{d}\right) \right) \quad (2.31)$$

est utilisé pour le champ de densité :  $d = 0.1$  représente l'échelle de longueur du gradient,  $s$  est le rapport de densité, et  $x_0$  est choisi comme étant un cinquième de la longueur du domaine. La résolution des systèmes préconditionnés est testée avec deux méthodes itératives de Krylov, à savoir le Richardson Minimal Residual (RMR) [12], et le General Minimal Residual (GMRES) [70]. Chaque section présente une comparaison des performances de ces solveurs. Plus précisément, dans le contexte de la résolution de l'équation de pression, les performances sont évaluées sur des DNS tridimensionnelles afin de déterminer la méthode la plus appropriée. Chaque section aboutit à une conclusion sur le schéma itératif le plus performant. En résumé, le GMRES offre la meilleure précision, quel que soit le rapport de densité  $s$ , que ce soit pour l'opérateur visqueux ou pour l'opérateur de pression. Bien que dans les cas tests unidimensionnels, le RMR soit plus performant pour  $s < 10$ , le GMRES converge plus rapidement lors des DNS de turbulence. Le GMRES est ainsi choisi comme le solveur itératif de prédilection pour l'équation de pression ainsi que pour le traitement semi-implicite des termes de diffusion. Il est utilisé dans toutes les simulations à densité variable présentées.

La technique de préconditionnement a été valorisée dans un article publié dans la revue *Computer and Fluids*<sup>3</sup>, dans lequel son efficacité est démontrée de manière plus approfondie. Plus précisément, des essais y sont réalisés sur des configurations incluant des conditions aux limites (traitées avec un schéma spectral de collocation Chebyshev) et des méthodes itératives supplémentaires sont explorées (Conjugate Gradient, BiConjugate Gradient, Stabilized BiConjugate Gradient).

<sup>3</sup>Loïc REYNIER et al. « A preconditioning for the spectral solution of incompressible variable-density flows ». In :

### 2.3.1 Opérateur de diffusion

Comme mentionné précédemment dans les équations (2.30), l'opérateur de diffusion est préconditionné par l'inverse de son équivalent à densité constante. Dans cette section,  $Sc$  est supposé comme égal à 1 pour simplifier les notations. Ainsi, les paramètres de contrôle sont le rapport de densité  $s$  et le coefficient de diffusion  $a = \frac{1}{2}\delta t / Re$ .

La figure 2.4 présente l'évolution du conditionnement  $\kappa$ , de l'opérateur  $\mathbf{V}_\rho$  et de son préconditionneur  $\mathbf{V}$ , en fonction du nombre de points  $N$ , du rapport de densité  $s$  et du coefficient visqueux  $a$ . Ici,  $\kappa$  est calculé via une décomposition en valeurs singulières. Les variations du conditionnement pour les préconditionnements à gauche et à droite ( $\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}_\rho$  et  $\mathbf{V}_\rho \mathbf{V}^{-1}$ , respectivement) sont également illustrées. Il est clair d'après les figures que même si  $\kappa(\mathbf{V}_\rho)$  et  $\kappa(\mathbf{V})$  atteignent des valeurs élevées ( $O(10^4)$ – $O(10^8)$ ), la technique de préconditionnement proposée réduit considérablement le conditionnement. De plus, les préconditionnements restent quasi indépendants du nombre de points  $N$  et restent petits ( $< O(10^2)$ ) même pour de grandes valeurs de  $a$  (c'est-à-dire pour des écoulements dominés par la viscosité) ou de  $s$  (c'est-à-dire pour des écoulements fortement stratifiés).

L'historique de convergence des solveurs itératifs RMR et GMRES est présenté dans la figure 2.5, pour  $(s, a) \in \{2, 10\} \times \{10^{-2}, 10^{-3}\}$ , à titre d'exemple. Les opérateurs étant directement inversés, une fonction nulle est utilisée comme estimation initiale. Lors d'une intégration temporelle, la solution au pas de temps précédent est utilisée comme valeur initiale pour accélérer la convergence. Par ailleurs, l'indépendance du taux de convergence par rapport au nombre de points  $N$  a été vérifiée, mais ces résultats ne sont pas détaillés ici pour des raisons de concision. Pour  $s = 2$ , les deux méthodes convergent vers un résidu d'environ  $10^{-12}$  en une vingtaine d'itérations de façon indépendantes de  $a$ . Toutefois, pour  $s = 10$ , RMR nécessite deux à trois fois plus d'itérations que le GMRES et converge sur des valeurs de résidus plus grandes. En matière de performances, en supposant que  $M$  représente le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre un critère de convergence, la complexité du RMR est en  $O(N \times M)$ , tandis que la complexité du GMRES est en  $O(N \times M^2)$ , en raison du processus d'orthonormalisation supplémentaire. Par conséquent, on peut s'attendre à ce que cette dernière soit beaucoup plus lente même pour quelques itérations. Cela est visible dans le tableau 2.1 qui montre le temps de calcul des méthodes RMR et GMRES sans construction explicite de matrices de dérivation.

Ainsi, dans le cadre de ces essais, le RMR offre le meilleur compromis entre performance et précision dans le cas où le rapport de densité  $s$  est faible, tandis que la méthode GMRES est plus efficace lorsque  $s \geq 10$ . Toutefois, en pratique, il a été observé dans les simulations DNS de turbulence que même pour  $s = 2$ , le GMRES présente des performances équivalentes au RMR, notamment lors durant les premières itérations où les effets de diffusion de masse sont les plus importants. Par conséquent, GMRES est sélectionné comme solveur définitif pour l'opérateur de diffusion.

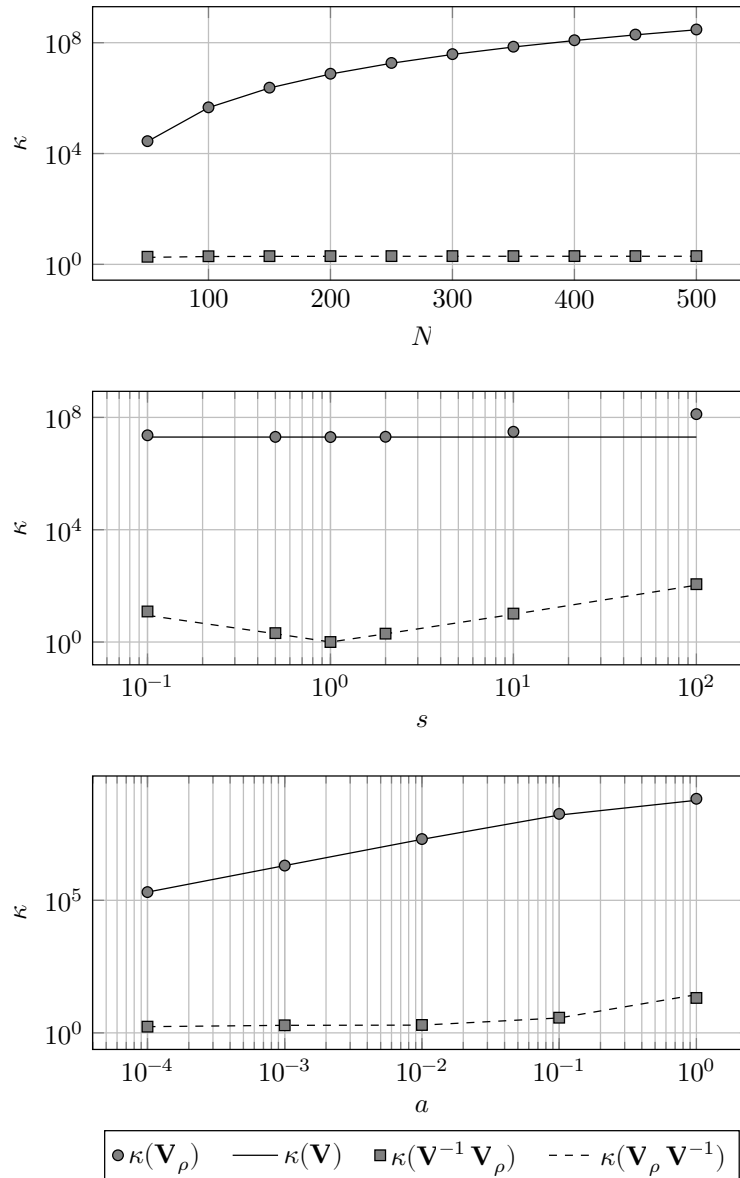
### 2.3.2 Opérateur de pression

Afin de garantir la conservation de la masse, la contrainte d'incompressibilité définie par l'équation (2.6) doit être résolue avec précision. Pour cela, DI PIERRO et ABID [21] propose une méthode de Fixed Point (FP, *Point Fixe*) pour résoudre l'équation de pression en la réécrivant sous la forme d'une équation de Poisson

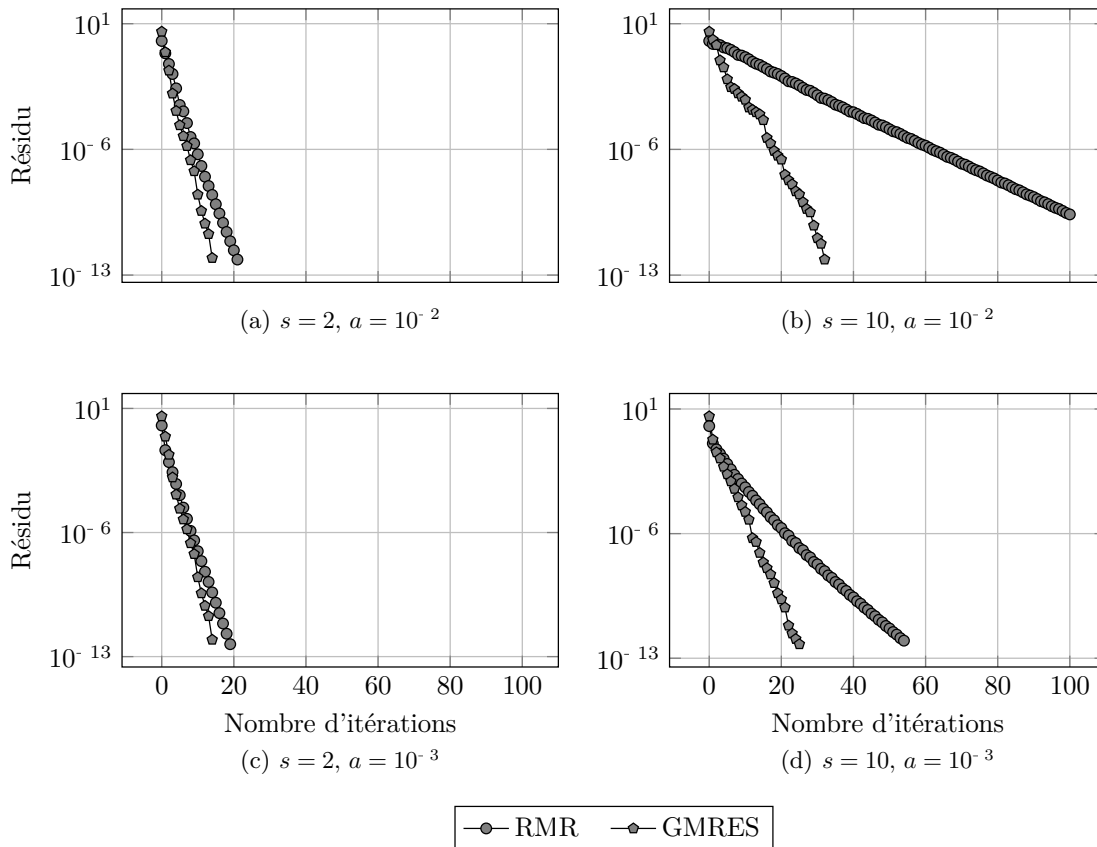
$$\nabla^2 \phi_i^n = \frac{\nabla \rho^m \cdot \nabla \phi_i^n}{\rho^m} + \frac{\rho^m}{\delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}_i^{n,*} \equiv h_i^n(\rho^m). \quad (2.32)$$

Cependant, comme mentionné précédemment, le système associé à l'équation (2.6) est fortement mal conditionné. Ce conditionnement dégrade les performances des solveurs itératifs. Dans le but d'améliorer le conditionnement de l'opérateur traité par le solveur itératif, le scalaire  $\Phi = \phi / \sqrt{\rho}$  est introduit afin de réécrire l'équation (2.6) sous la forme d'une équation de Helmholtz modifiée

$$K_\rho(\Phi) = \nabla^2 \Phi + \left( \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{3}{4} \frac{\|\nabla^2 \rho\|}{\rho^2} \right) \Phi = \frac{\sqrt{\rho}}{\delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (2.33)$$



**Figure 2.4** : Conditionnement des opérateurs de diffusion en fonction (haut) du nombre de points de discrétisation  $N$  avec  $s = 2$  et  $a = 10^{-2}$ ; (milieu) du rapport de densité  $s$  avec  $N = 256$  et  $a = 10^{-2}$ ; (bas) du coefficient de diffusion  $a$  avec  $N = 256$  et  $s = 2$ . Les calculs sont effectués sur un cas test unidimensionnel où  $\rho$  est défini par l'équation (2.31) page 35 et les opérateurs sont discrétisés par un schéma spectral Galerkin Fourier-Fourier.



**Figure 2.5** : Historiques de convergence des solveurs itératifs pour l'équation de diffusion préconditionnée  $\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}_\rho(\rho, \mathbf{u}) = \mathbf{b}$ . Les calculs sont effectués sur un cas test unidimensionnel où  $\rho$  est défini par l'équation (2.31) page 35 et les opérateurs sont discrétisés par un schéma spectral Galerkin Fourier–Fourier avec  $N = 256$  points.

Nombre d'itérations	RMR	GMRES
5	$5.6 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$
10	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$
20	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$9.7 \cdot 10^{-2}$
40	$4.2 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$

**Table 2.1** : Temps de calcul (en secondes) des solveurs itératifs pour l'équation de diffusion préconditionnée  $\mathbf{V}^{-1} \mathbf{V}_\rho(\rho, \mathbf{u}) = \mathbf{b}$  avec  $s = 1000$ ,  $a = 10^{-3}$  et  $N = 256$ . Les calculs sont effectués sur un cas test unidimensionnel où  $\rho$  est défini par l'équation (2.31) page 35 et les opérateurs sont discrétisés par un schéma spectral Galerkin Fourier–Fourier avec  $N = 256$  points. Les calculs sont réalisés sur 1 cœur d'un nœud de calcul Dell PowerEdge C8220 équipé d'un processeur Intel Xeon E5-2670.

La transformation de l'opérateur  $L_\rho$  vers l'opérateur  $K_\rho$  est obtenue en développant  $L_\rho$  et en injectant  $\phi = \sqrt{\rho}\Phi$  comme détaillé ci-dessous :

$$\begin{aligned}
 L_\rho(\rho, \phi) &= \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho} \nabla \phi \right) \\
 &= \frac{1}{\rho} \nabla^2 \phi + \nabla \frac{1}{\rho} \cdot \nabla \phi \\
 &= \frac{1}{\rho} (\sqrt{\rho} \nabla^2 \Phi + \nabla^2 \sqrt{\rho} \Phi + 2 \nabla \sqrt{\rho} \cdot \nabla \Phi) - \frac{\nabla \rho}{\rho^2} \cdot (\sqrt{\rho} \nabla \Phi + \Phi \nabla \sqrt{\rho}) \\
 &= \frac{1}{\rho} \left( \sqrt{\rho} \nabla^2 \Phi + \left( \frac{1}{2} \frac{\nabla \rho}{\sqrt{\rho}} - \frac{1}{4} \frac{\|\nabla \rho\|^2}{\rho^{3/2}} \right) \Phi + \frac{\nabla \rho}{\sqrt{\rho}} \cdot \nabla \Phi \right) - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\nabla \rho}{\sqrt{\rho}} \cdot \nabla \Phi + \frac{1}{2} \frac{\|\nabla \rho\|^2}{\rho^{3/2}} \Phi \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\rho}} \left( \nabla^2 \Phi + \left( \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{3}{4} \frac{\|\nabla^2 \rho\|}{\rho^2} \right) \Phi \right), \\
 K_\rho(\rho, \Phi) &= \sqrt{\rho} L_\rho(\phi) \\
 &= \nabla^2 \Phi + \left( \frac{1}{2} \frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{3}{4} \frac{\|\nabla^2 \rho\|}{\rho^2} \right) \Phi.
 \end{aligned}$$

Il convient de rappeler qu'une technique similaire de changement de variable est utilisée par CONCUS et GOLUB [16] dans le cas général des équations elliptiques à coefficients variables. Il est important de mentionner que lorsque des conditions aux limites entièrement périodiques sont utilisées, la fonction  $\Phi$  reste périodique.

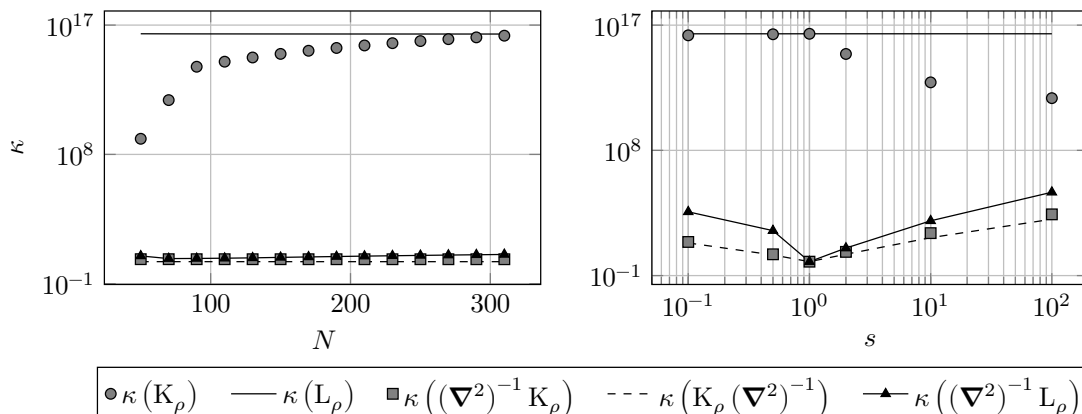
Tout comme pour l'opérateur visqueux, l'opérateur  $K_\rho$  est préconditionné par l'inverse de l'opérateur laplacien discret qui est équivalent à l'inverse de  $K_\rho$  à densité constante. En utilisant le profil de densité décrit par l'équation (2.31) le conditionnement des opérateurs de pression (préconditionnés ou non) est présenté dans la figure 2.6 en fonction du nombre de points  $N$  ou du rapport de densité  $s$ . Il est notable que  $K_\rho$  et  $L_\rho$  sont tous deux mal conditionnés, même si l'utilisation de  $K_\rho$  à la place de  $L_\rho$  conduit à une amélioration. La figure montre que les préconditionnements à gauche et à droite fournissent une diminution du conditionnement  $\kappa$  de quatre à cinq ordres de grandeur pour tous les jeux de paramètres. En particulier, le conditionnement semble être indépendant du nombre de points  $N$ . On peut également observer que  $\kappa((\nabla^2)^{-1} K_\rho) < \kappa((\nabla^2)^{-1} L_\rho)$  pour tout rapport de densité  $0.1 \leq s \leq 100$ .

Les mêmes algorithmes que dans la section précédente (RMR et GMRES) sont testés et comparés au FP proposé par DI PIERRO et ABID [21]. L'historique de convergence de ces solveurs est présenté dans figure 2.7 pour  $s = 2$  et  $s = 10^4$ . Le GMRES a la convergence la plus rapide, conduisant à une décroissance de douze décades en environ dix itérations dans les deux cas. Le RMR nécessite quatre fois plus d'itérations pour atteindre le même niveau de convergence que le GMRES à  $s = 2$  et ne converge pas pour  $s = 10$ . Enfin, la méthode FP a le même taux de convergence que le GMRES, cependant, son résidu sature à  $O(10^{-9})$ . À cet égard, les méthodes RMR et GMRES fournissent une amélioration des performances. Le GMRES semble, à première vue, plus robuste, mais pour des valeurs de  $s$  faibles, le RMR, connu pour être moins exigeant en termes de calculs, pourrait être préféré.

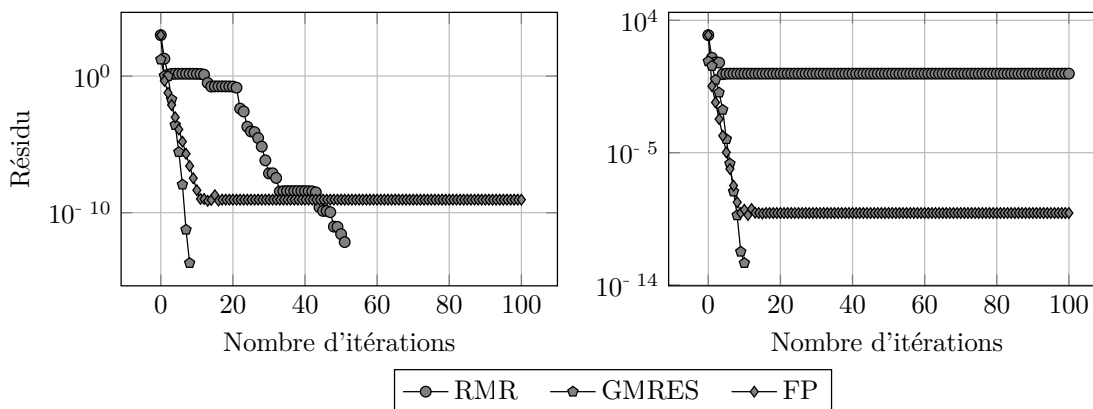
Le tableau 2.2 présente les temps de calcul des solveurs discutés pour différents rapports de densité dans le cadre de DNS sur la solution pseudoexacte (équations (1.32)) Tout d'abord, il est remarquable que la performance de chaque solveur est indépendante du rapport de densité  $s$ , ce qui est cohérent avec le conditionnement des opérateurs préconditionnés. Cette caractéristique valide donc la performance de la méthode de préconditionnement même pour des rapports de densité élevés. Ensuite, il est à noter que les solveurs RMR et GMRES sont plus rapides que le FP. Cette différence de performance peut s'expliquer par la formulation du problème :  $K_\rho$  nécessite seulement deux transformations physiques/spectrales tandis que quatre sont nécessaires pour évaluer  $L_\rho$ . L'efficacité du changement de variable  $L_\rho(\rho, \phi) \rightarrow K_\rho(\rho, \Phi)$  apporte donc également un gain en performance. De plus, il est important

<sup>4</sup>L'indépendance du taux de convergence par rapport au nombre de points  $N$  a été vérifiée. Elle n'est pas présentée ici pour des raisons de concision.





**Figure 2.6** : Conditionnement des opérateurs de pressions en fonction (gauche) du nombre de points de discrétisation  $N$  avec  $s = 2$  et (droite) du rapport de densité  $s$  avec  $N = 256$ . Les calculs sont effectués sur un cas test unidimensionnel où  $\rho$  est défini par l'équation (2.31) page 35 et les opérateurs sont discrétisés par un schéma spectral Galerkin Fourier–Fourier.



**Figure 2.7** : Historiques de convergence des solveurs itératifs pour résoudre l'équation (2.33) page 36 de pression modifiée : (gauche)  $s = 2$ ; (droite)  $s = 10$ . Les calculs sont effectués sur un cas test unidimensionnel où  $\rho$  est défini par l'équation (2.31) page 35 et les opérateurs sont discrétisés par un schéma spectral Galerkin Fourier–Fourier avec  $N = 256$  points.

de noter que le RMR et le GMRES ont des performances par itération équivalentes. Cependant, étant donné que le RMR est moins robuste et nécessite un plus grand nombre d'itérations, le GMRES est choisi comme solveur définitif de l'équation de pression. Enfin, il est remarquable que le temps de calcul par itération, par thread et par cellule est de l'ordre de grandeur du temps d'horloge du processeur.

## 2.4 Validation

Suite au développement du modèle numérique, cette section se consacre à la validation de celui-ci sur des problèmes concrets et réalistes. Les performances et l'efficacité de la méthode proposée sont évaluées en la confrontant à des configurations d'écoulements représentatives. Notamment, la capacité du modèle à capturer avec précisions les phénomènes dynamiques et instationnaires propres aux écoulements turbulents est vérifiée dans les sections 2.4.1 et 2.4.2 en effectuant des simulations sur des cas complexes, tels que la Rayleigh–Taylor Instability (RTI, *Instabilité de Rayleigh–Taylor*) et le jet tourbillonnaire à densité variable.

Solveur itératif	FP ([21])	RMR	GMRES
$s = 2$			
Itérations	7	5	6
Temps	0.5973	0.2124	0.2480
Temps/itération	0.0853	0.0425	0.0413
Temps/itération/thread	0.0107	0.0053	0.0052
Temps/itération/thread/cellule	5.1e-09	2.5e-09	2.5e-09
$s = 6$			
Itérations	9	7	8
Temps	0.7737	0.3045	0.3573
Temps/itération	0.0860	0.0435	0.0447
Temps/itération/thread	0.0107	0.0054	0.0056
Temps/itération/thread/cellule	5.1e-09	2.6e-09	2.7e-09
$s = 10$			
Itérations	10	8	8
Temps	0.8232	0.3477	0.3547
Temps/itération	0.0823	0.0435	0.0443
Temps/itération/thread	0.0103	0.0054	0.0055
Temps/itération/thread/cellule	4.9e-09	2.6e-09	2.6e-09

**Table 2.2** : Temps de calcul (en secondes) des solveurs itératifs pour l'équation (2.33) page 36 de pression modifiée dans le cas de la solution pseudoexacte (équations (1.32) page 13). Différentes valeurs du rapport de densité  $s$  sont étudiées, avec une discrétisation de  $128 \times 128 \times 128$  points. Les calculs sont effectués sur les 8 cœurs d'un nœud de calcul Dell PowerEdge C8220 équipé d'un processeur Intel Xeon E5-2670. Les temps sont moyennés sur dix itérations ( $10\delta t \approx \pi/2$ ).

En parallèle, la section section 2.4.3 présente les performances de l'implémentation du modèle dans le code **POUSSINS** en termes d'efficacité de calcul et de parallélisation. En évaluant le temps de calcul et l'accélération obtenue en utilisant différents nombres de processeurs, la capacité du code à exploiter pleinement les ressources disponibles est déterminée.

### 2.4.1 Instabilité de Rayleigh–Taylor bidimensionnelle

Dans un premier temps, l'efficacité et la robustesse de la méthode présentée sont illustrées à travers une configuration classique de RTI bidimensionnelle : un fluide plus lourd est maintenu au-dessus d'un fluide plus léger et l'accélération gravitationnelle est opposé au gradient de densité. Des conditions aux limites sans glissement sont utilisées sur les parois supérieure et inférieure, tandis que des conditions aux limites périodiques sont employées sur les frontières de gauche et droite. Pour cela un schéma spectral de collocation Chebyshev est appliqué dans la direction verticale, tandis qu'un schéma Galerkin Fourier–Fourier est appliqué dans la direction horizontale. Le profil de densité initial est une fonction d'Heaviside lissée dans la direction verticale et perturbée horizontale avec une petite perturbation d'amplitude  $\eta$

$$\rho(x, z, t = 0) = 1 + \frac{s - 1}{2} \left( \tanh\left(\frac{z}{\delta} + \eta(x, L_x)\right) + 1 \right). \quad (2.34)$$

La taille de la boîte de calcul est fixée à  $[2L_x, 2L_z] = [2, 2]$  (discrétisée avec  $N^2$  points de grille variant de  $256^2$  à  $512^2$ ). L'épaisseur initiale est  $\delta = 0.2$  et  $s$  est le rapport de densité. Le champ de vitesse initiale est fixé à zéro. La gravité est ajoutée via une force volumique  $\mathbf{f} = -Fr^{-1} \mathbf{e}_z$  fonction du nombre de Froude  $Fr$ . Il est essentiel de souligner que dans cette configuration, les calculs sans préconditionnement ne convergent pas, et des oscillations numériques prennent le dessus en quelques itérations.

La figure 2.8 présente les contours de densité à différents instants de la simulation pour un cas à

perturbation monomodale ((a1), (a2), (a3))

$$\eta = 0.1 \cos\left(\pi \frac{x}{L_x}\right), \quad (2.35)$$

et un cas à perturbation multimodale ((b1), (b2), (b3))

$$\eta = 0.1 \left( \sin\left(13\pi \frac{x}{L_x}\right) + \cos\left(17\pi \frac{x}{L_x}\right) + \cos\left(19\pi \frac{x}{L_x}\right) \right). \quad (2.36)$$

Dans les deux cas, les paramètres de contrôle sont  $Re = 1000$ ,  $Fr = 1$ ,  $Sc = 1$  et  $s = 10$ . Il convient de noter que dans cette configuration RTI bidimensionnelle où le fluide est initialement au repos, il est difficile de donner une interprétation physique au nombre de Reynolds. Celui-ci est utilisé ici uniquement comme un coefficient de diffusion dans les équations. Par conséquent, il n'est pas possible de définir une échelle de temps adimensionnelle. Les instants choisis sont déterminés de façon qualitative et ne doivent pas être interprétés comme une comparaison directe.

Dans le cas à mode unique, on observe le champignon caractéristique de la RTI qui se développe vers le bas au milieu du domaine de calcul. À mesure que le fluide plus lourd pénètre le fluide plus léger, l'interface s'enroule en deux tourbillons, comme présenté dans BELL et MARCUS [5, figure 4]. Dans le cas à modes multiples, les ondes commencent à se développer indépendamment les unes des autres avant de commencer à interagir fortement les unes avec les autres, reproduisant des motifs similaires à ceux présentés dans BELL et MARCUS [5, figure 5]. Dans les deux cas, on peut observer que l'interface est clairement définie sans oscillations numériques, ce qui valide la robustesse de la méthode.

#### 2.4.2 Instabilité d'un jet tourbillonnant à densité variable

La fiabilité de la méthode proposée est désormais illustrée à travers un cas représentatif d'écoulement tridimensionnel à densité variable. À cet égard, le jet tourbillonnant à densité variable étudié par DI PIERRO et ABID [21, section 7.3] est testé. L'objectif est de capturer la déstabilisation du jet lors d'une DNS et de comparer le taux de croissance de la perturbation avec celui obtenu par analyse de stabilité linéaire. L'écoulement de base ici considéré s'écrit

$$\rho_0(r) = 1 + (s - 1) \exp -r^2, \quad (2.37a)$$

$$\omega_x(r) = 2q \exp -r^2, \quad (2.37b)$$

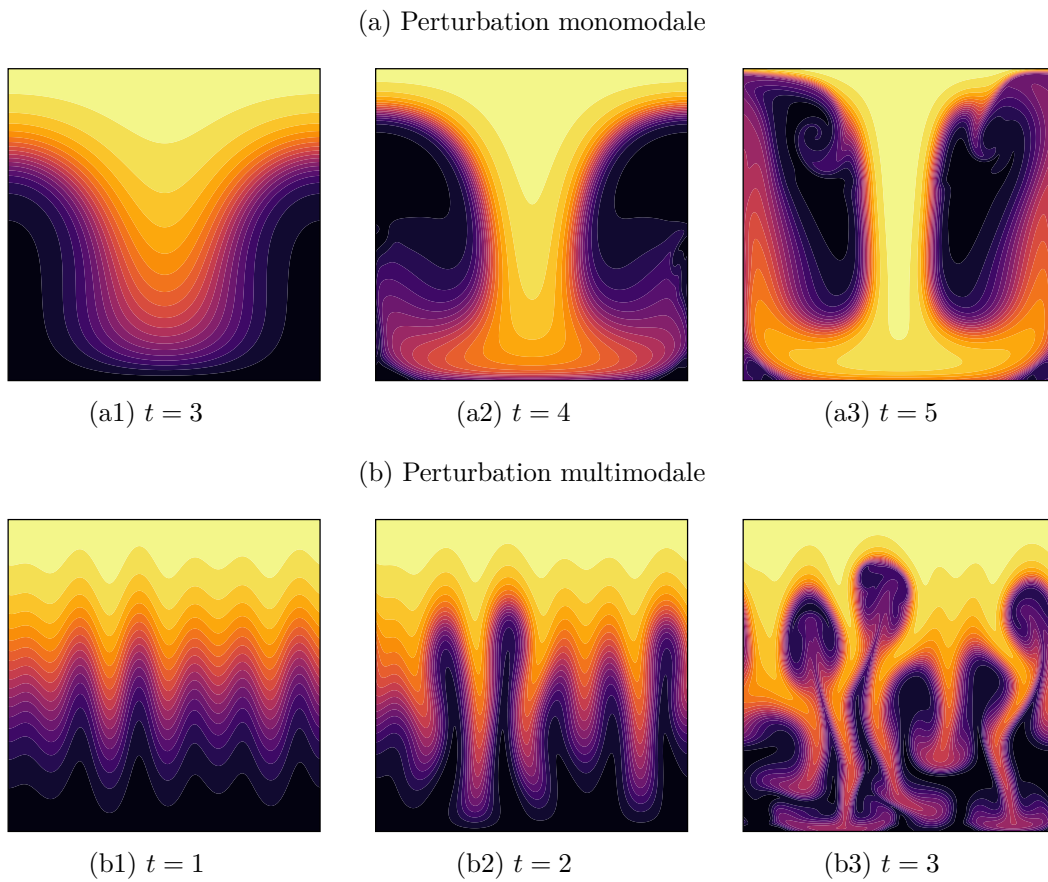
$$\bar{u}_x(r) = \exp -r^2, \quad (2.37c)$$

où  $\bar{\mathbf{u}} = (0, \bar{u}_\theta, \bar{u}_x)^\top$  est le champ de vitesse de base (avec  $\bar{u}_\theta \mathbf{e}_\theta = -(\nabla^2)^{-1}(\nabla \times \omega_x \mathbf{e}_x)$ ),  $\omega_x$  est la vorticité axiale, et  $q$  est le paramètre tourbillonnant. La simulation est réalisée dans un domaine de taille  $2\pi \times 2\pi \times 4\pi$ , discrétisé avec 256 points dans chaque direction. Le nombre de Reynolds, basé sur la vitesse axiale, est fixé à  $Re = 100$ , et les autres paramètres de contrôle adimensionnels sont réglés à  $Sc = 1$ ,  $s = 2$ ,  $q = 0.5$ . Une perturbation de la forme  $\varphi(r) \exp(i(kx + m\theta))$  est surimposée sur l'écoulement de base. Les modes azimuthal  $m = 4$  et longitudinal  $k = 1$  sont sélectionnés. L'analyse linéaire de stabilité, telle que décrite dans DI PIERRO et ABID [21, section 7.3], démontre que ces modes gouvernent la dynamique pour les temps longs. La figure 2.9 présente l'évolution de la perturbation de vitesse axiale. Le taux de croissance extrait des données DNS

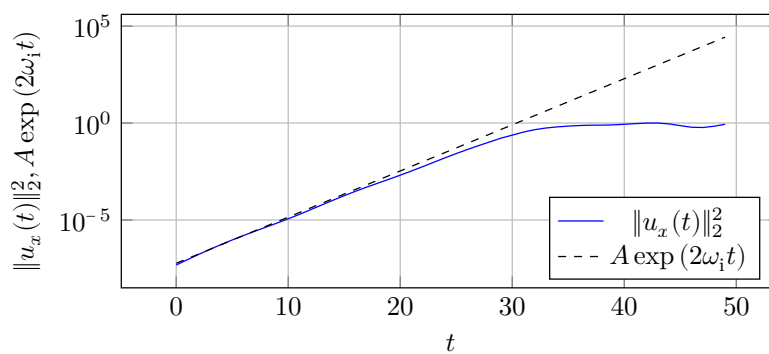
$$\omega_{i, \text{DNS}} = \frac{1}{2(t_1 - t_0)} \log \left( \frac{\|u_x(t_1)\|_2^2}{\|u_x(t_0)\|_2^2} \right) = 0.2746 \approx 0.275 \quad (2.38)$$

correspond au taux  $\omega_i = 0.274$  obtenu par l'analyse linéaire. Ce dernier est calculé à partir de la norme du champ de vitesse axial  $u_x$ , avec  $t_0 = 2.0$  et  $t_1 = 5.0$ . Afin d'obtenir la perturbation, deux simulations sont réalisées : l'une avec la perturbation exponentielle injectée et l'autre sans perturbation, représentant ainsi l'écoulement de base. La perturbation est ensuite obtenue en soustrayant les deux solutions.

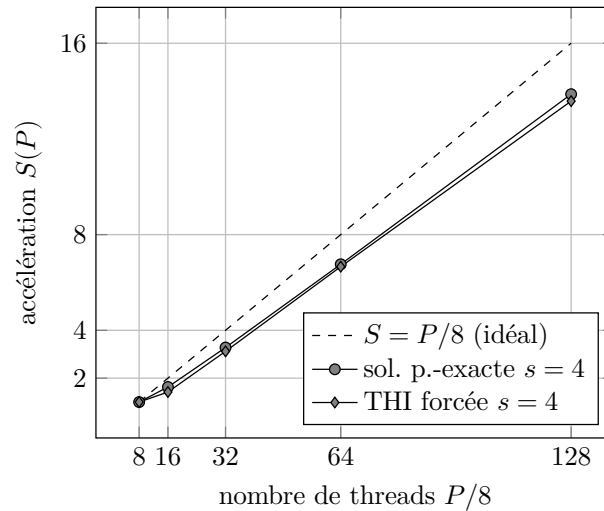
L'obtention d'un taux de croissance similaire à celui prédit par la théorie linéaire valide quantitativement la capacité de notre modèle numérique à capturer des dynamiques fines. Ceci est essentiel pour l'étude des petites échelles d'un écoulement turbulent.



**Figure 2.8 :** Isocontours du champ de densité à différents instants lors de DNS de RTI bidimensionnelles utilisant le RK2/CN couplé avec le GMRES préconditionné pour les opérateurs de diffusion et de pression avec  $s = 10$ ,  $Re = 1000$ ,  $Fr = 1$ ,  $Sc = 1$ , et  $256^2$  points de grille.



**Figure 2.9 :** Évolution de la norme de la perturbation de la vitesse axiale durant une DNS de jet tourbillonnant à densité variable avec  $Re = 100$ ,  $Sc = 1$ ,  $s = 2$ ,  $q = 0.5$ ,  $m = -4$  et  $k = 1$ . Le taux de croissance obtenu par DNS est  $\omega_{i, \text{DNS}} = 0.275$ , tandis que celui prédit par l'analyse linéaire est  $\omega_i = 0.274$  [21].



**Figure 2.10** : Accélération du code DNS POUSSINS définie à partir du temps par itération pour 8 threads. Les mesures sont effectuées sur les 100 premières itérations de simulations de la solution pseudoexacte (équations (1.32) page 13) des équations à densité variable et de DNS THI à densité variable forcée :  $Re = 1000$ ,  $s = 4$ ,  $Sc = 1$ ,  $N = 512^3$ . Une efficacité de  $\approx 85\%$  est mesurée pour 128 threads.

### 2.4.3 Performances

En conclusion de la présentation du modèle numérique, la figure 2.10 l'accélération du code DNS POUSSINS implémentant les procédures numériques détaillées dans ce chapitre. L'accélération est mesurée lors de simulations réalisées sur 8 à 256 threads (files d'exécutions) sur le centre de calcul Pôle de Modélisation et de Calcul en Sciences de l'Ingénieur et de l'Information (PMCS2I). Elle est définie à partir du temps de calcul par itération (d'avancement temporel des équations) sur 8 threads<sup>5</sup> comme

$$\text{accélération}(P) \equiv S(P) = \frac{1 \text{ temps par itération avec } P \text{ threads}}{8 \text{ temps par itération avec } 8 \text{ threads}}. \quad (2.39)$$

Les mesures sont réalisées en prenant la moyenne des cinquante premières itérations de simulations de la solution pseudoexacte (équations (1.32)) des équations à densité variable et de simulations de THI forcée à densité variable. Dans les deux cas, les simulations ont été réalisées sur des grilles avec  $512^3$  points. Il est intéressant de noter que des accélérations similaires sont observées pour les deux types de simulation. Dans nos simulations turbulentes, qui sont principalement réalisées avec 64 ou 128 threads, une efficacité désirable de  $\approx 85\%$  est observée.

## 2.5 Simulations et post-traitement

Pour conclure ce chapitre consacré aux méthodes numériques, cette section expose les ressources matérielles employées pour les simulations, ainsi que la méthodologie de l'analyse post-traitement des données issues des DNS.

En raison des ressources de calculs considérables requises pour les DNS, celles-ci sont réalisées sur un centre de calcul dédié. Étant donné que le temps de calcul est une ressource précieuse, le code DNS POUSSINS se concentre exclusivement sur la résolution des équations et la sauvegarde des champs de l'écoulement sous forme de fichiers binaires bruts. L'ensemble du processus d'analyse de données est effectué ultérieurement. Il convient de noter que le calcul de certaines grandeurs, requises dans le processus d'analyse, est réalisé en parallèle par le solveur DNS, afin de bénéficier de ses performances.

<sup>5</sup>L'accélération, qui est généralement définie par rapport au temps par itération en séquentiel ( $P = 1$ ), est ici définie en utilisant le temps d'itération avec 8 threads, en raison des exigences en mémoire.

Cependant, l'analyse statistique requiert un volume important de données qui ne peut pas être stocké sur le centre de calcul utilisé. Une fois que les simulations sont achevées, les données sont transférées vers une station de travail qui fait office de serveur de stockage et de machine de calcul pour le post-traitement. La visualisation et le post-traitement des données des simulations sont effectués sur cette station à l'aide d'un logiciel dédié, après la réalisation des simulations.

La section 2.5.1 détaille les ressources mises en œuvre sur le centre de calcul pour réaliser les simulations. La section 2.5.2 présente quant à elle, le logiciel de post-traitement spécifiquement conçu pour le code de calcul DNS POUSSINS.

### 2.5.1 Centres de calculs

Les simulations de cette étude sont effectuées sur deux des trois centres de calcul de la Fédération Lyonnaise de Modélisation et Sciences Numériques (FLSMSN), à savoir le Pôle de Compétence en Calcul Hautes Performances Dédiés (P2CHPD) et le PMCS2I. Le P2CHPD, où l'espace alloué pour cette étude est restreint, est employé pour les tests numériques ainsi que pour les simulations de jet. Le DNS de turbulence, sont quant à elles, réalisées sur le PMCS2I.

En ce qui concerne les ressources de calculs, les simulations de turbulence et de jets, effectuées avec une résolution  $256^3$ , emploient 64 threads répartis sur 8 nœuds du centre de calcul. En général, ces simulations nécessitent entre 2 et 5 jours de calcul, ce qui équivaut à un total de 3072 à 7680 heures de calcul.

### 2.5.2 Module de post-traitement ROAST

Une fois les données provenant des DNS rapatriées sur la station de travail servant de serveur de stockage et de machine de post-traitement, les champs sont analysés et visualisés au moyen du code Real-time Open-source Analysis Software for Turbulence (ROAST).

Ce code, élaboré durant la thèse, constitue un ensemble d'outils dédiés au post-traitement des champs issus de DNS de turbulence. Il s'agit d'un paquet Python parallélisé utilisant les bibliothèques NumPy, SciPy, mpi4py, PyFFTW et h5py. Il fournit des modules permettant :

- le calcul de grandeurs descriptives des écoulements incompressibles
- le calcul de grandeurs descriptives des écoulements turbulents
- l'analyse statistique des écoulements turbulents
- la visualisation et l'export des champs de l'écoulement

Toutes les données présentées dans ce document sont calculées et exportées à l'aide du code ROAST. Même si le code ROAST a été conçu spécifiquement pour le post-traitement des données générées par le solveur DNS POUSSINS, sa modularité permet son utilisation dans d'autres contextes. En effet, d'une part, toutes les fonctions sont conçues pour accepter des tableaux NumPy comme arguments, ce qui permet de les utiliser de manière indépendante. D'autre part, le code est structuré selon une approche orientée objet. En résumé, une session d'analyse effectuée avec ROAST se déroule comme suit :

1. création d'un objet `Simulation` pour accéder aux données DNS de manière standardisée ;
2. à partir de l'objet `Simulation`, création d'un objet `Domain` fournissant les caractéristiques du maillage, ainsi qu'un objet `FunctionSpace` fournissant des fonctions de transformations mathématiques associées au domaine (dérivées, intégrales, transformations de Fourier, etc.) ;
3. utilisation des différentes fonctions de calcul en utilisant les objets créés en tant qu'arguments.

Afin d'adapter ROAST à un autre solveur DNS ou à un autre format de données, il suffit de créer un objet dérivé de la classe `Simulation`, en spécifiant comment accéder aux données en accord avec les conventions de ROAST. Le module de post-traitement automatique et parallélisé nécessite que les

données soient stockées au format Hierarchical Data Format 5 (HDF5). L'architecture du format de données utilisé par ROAST et pour le stockage de données de cette étude est décrite dans l'annexe A.

Tout comme le code DNS POUSSINS, ROAST bénéficie d'un module spectral qui permet le calcul précis des dérivées et l'analyse spectrale des champs. À cette fin, les transformées de Fourier sont calculées à travers l'interface fournie par la bibliothèque PyFFTW (ou avec la bibliothèque FFT de NumPy en cas d'instabilité de PyFFTW). Cette interface permet l'utilisation des algorithmes de FFTW au sein d'un code Python. Pour des champs de dimension  $256^3$ , couramment utilisés dans les simulations de cette étude, l'utilisation de PyFFTW ne présente pas d'avantages significatifs en termes de performances (comparativement à NumPy) pour le calcul individuel d'une FFT. Cependant, l'algorithme d'optimisation de « *planning* » offert par FFTW permet d'obtenir une amélioration substantielle de l'efficacité lors du calcul séquentiel de nombreuses FFT.

En ce qui concerne la parallélisation, le code n'adopte pas de stratégie de décomposition de domaine pour accélérer les opérations telles que les FFT. Contrairement à la DNS, le nombre de calculs de FFT est réduit, notamment car lors du post-traitement, il est possible de stocker en mémoire des champs qu'il n'est pas judicieux de conserver durant la simulation. Ainsi, le code est parallélisé de manière à exécuter plusieurs opérations en parallèle. Par exemple la lecture de  $P$  fichiers de sortie du solveur, ou le calcul des spectres de  $P$  instantanés de l'écoulement issus de la simulation, où  $P$  représente le nombre de threads utilisés lors du post-traitement.

# Chapitre 3

## Turbulence isotrope à densité variable

### Table des matières

---

3.1	Méthode de forçage . . . . .	50
3.1.1	Méthode de Lundgren . . . . .	50
3.2	Méthodologie d'étude statistique . . . . .	52
3.2.1	Initialisation à densité variable . . . . .	52
3.2.2	Sélection de l'intervalle d'étude . . . . .	54
3.3	Analyse temporelle . . . . .	58
3.3.1	Évolution temporelle de l'énergie cinétique . . . . .	58
3.3.2	Mélange du champ de densité . . . . .	61
3.4	Analyse statistique . . . . .	64
3.4.1	Analyse statistique des fluctuations de vitesse . . . . .	67
3.4.2	Analyse des moments du champ de vitesse . . . . .	70
3.4.3	Conclusion sur l'analyse statistique . . . . .	71
3.5	Analyse spectrale . . . . .	72
3.5.1	Visualisation du champ de vortacité . . . . .	72
3.5.2	Spectres d'énergie . . . . .	72
3.5.3	Spectres d'instabilité RTI . . . . .	75
3.5.4	Modèle de prédiction de modification du spectre . . . . .	78
3.6	Conclusions . . . . .	82
3.6.1	Résumé des résultats . . . . .	82
3.6.2	Perspectives . . . . .	84

---

Ce chapitre expose l'étude principale des travaux de thèse, à savoir l'analyse de l'interaction entre une turbulence isotrope incompressible et un champ de densité inhomogène.

L'objectif consiste à mener une analyse de la dynamique des petites structures de l'écoulement en vue de quantifier l'influence des variations de densité sur la turbulence isotrope. Étant donné que, conformément aux idées de KOLMOGOROV [50], quelle que soit la source de la turbulence isotrope, la dynamique aux petites échelles est universelle, ce type d'étude est couramment utilisé pour comprendre les phénomènes turbulents à densité constante. Notamment, les travaux de KERR [49], VINCENT et MENEGUZZI [79], JIMÉNEZ et al. [46] et ISHIHARA et al. [41], parmi d'autres, ont préalablement exploré la dynamique turbulente des petites échelles contribuant ainsi de manière significative à la compréhension des phénomènes turbulents. En outre, DUBRULLE [24] et SREENIVASAN et ANTONIA [75] présentent en détail les résultats actuellement connus dans ce contexte. Parmi ces résultats, on peut citer les lois d'échelles pour les différents moments du champ de vitesse qui décrivent la répartition spatiale des structures, ainsi que les modèles d'intermittence et de répartition spectrale d'énergie.



En appliquant une méthodologie inspirée des travaux des auteurs cités, les données provenant de DNS de Turbulence Homogène Isotrope (THI) forcée sont post-traitées et analysées par le biais d'outils d'analyse statistique et spectrale. L'objectif de cette démarche est d'étudier si les lois établies pour la turbulence à densité constante subissent des modifications suite à l'injection d'effets de masse dans l'écoulement étudié.

Afin de réaliser cette investigation, les simulations sont effectuées en introduisant un champ de densité inhomogène au sein d'un champ turbulent résultant d'une simulation préliminaire à densité constante. Le maintien d'un état pleinement turbulent est assuré par une méthode de Lundgren spécifiquement adaptée aux équations à densité variable. La méthode de forçage est exposée en détail dans la section 3.1.

L'analyse statistique de la dynamique requiert une sélection minutieuse de la fenêtre temporelle au cours de laquelle l'écoulement peut être considéré comme étant proche d'un état statistiquement stationnaire. La section 3.2 expose la méthodologie utilisée pour l'initialisation des simulations et la sélection des données pour l'étude statistique de l'écoulement. Il convient de noter que, en raison des effets de diffusion de masse, l'écoulement demeure non stationnaire jusqu'à l'achèvement du processus de mélange. Il est donc essentiel de parvenir à un compromis entre le taux de mélange et le nombre d'échantillons pour l'analyse statistique. Cette section détaille spécifiquement la sélection d'une fenêtre temporelle où l'écoulement présente une turbulence statistiquement stationnaire, tout en conservant une dynamique de mélange, en vue de la réalisation des calculs statistiques.

Les sections 3.3 à 3.5 présentent les résultats dérivés des analyses des données provenant des DNS. Notamment, les PDF du champ de vitesse et les spectres d'énergie obtenus lors des DNS à densité variable sont comparés à ceux de la simulation initiale à densité constante. Conformément aux détails fournis dans le chapitre 1, les paramètres de contrôle des simulations sont

$$Re = 1000, \quad Sc = 1, \quad s \in [2, 8]. \quad (3.1)$$

En résumé, cette valeur du nombre de Reynolds permet d'étudier la THI tout en maintenant une discrétisation abordable avec nos capacités de calcul. Un nombre de Schmidt de 1 est représentatif des mélanges gazeux et assure un équilibre entre les effets de diffusion visqueuse et massique. Des simulations à  $s < 1$ , notamment  $s = \frac{1}{2}$  et  $s = \frac{1}{4}$ , ont également été réalisées. Bien que cela ne soit pas représentatif du cas d'étude, puisque cela modélise l'émission d'un gaz léger dans l'atmosphère, cela permet d'étudier la présence d'une symétrie entre  $s$  et  $s^{-1}$  dans la dynamique à densité variable.

Pour simplifier le discours, les simulations sont identifiées par leur nombre de points  $N$  de discrétisation dans chaque direction et leur rapport de densité  $s$ . Par exemple, une simulation avec un nombre de Reynolds de 1000, un nombre de Schmidt de 1 et un rapport de densité de 4, utilisant un maillage de  $256^3$  points, est ainsi désignée par « 256-4 ». En outre, le tableau 3.1 récapitule les paramètres de chaque simulation effectuée, en fournissant également les valeurs correspondantes des grandeurs caractéristiques associées à celles-ci.

Simulation	$N$	$Re$	$s$	$d$	$Sc$	$t_f$	$\Gamma$	$\langle Re_\lambda \rangle_\Gamma$	$\langle T \rangle_\Gamma$	$\langle L \rangle_\Gamma$	$\langle \lambda \rangle_\Gamma$	$10^3 \langle \eta \rangle_\Gamma$	$k_{\max} \langle \eta \rangle_\Gamma$	$\langle \lambda \rangle_\Gamma / \langle \eta \rangle_\Gamma$	$-\langle S \rangle_\Gamma$	$\langle F \rangle_\Gamma$
256-0.25	256	$10^3$	0.25	10	1	6.0	[2, 6]	246	1.43	0.81	0.20	6.41	1.1	31.0	0.51	4.92
256-0.5	256	$10^3$	0.5	10	1	10.0	[2, 6]	246	1.43	0.81	0.20	6.41	1.1	31.0	0.51	4.92
256-1	256	$10^3$	1	10	1	70.0	[40, 70]	214	1.44	0.78	0.17	5.85	1.0	28.8	0.48	4.97
256-2	256	$10^3$	2	10	1	6.0	[2, 6]	172	1.42	0.81	0.14	5.39	0.92	25.9	0.43	4.82
256-4	256	$10^3$	4	10	1	10.0	[2, 6]	143	1.39	0.80	0.12	4.86	0.83	23.7	0.30	4.37
256-6	256	$10^3$	6	10	1	6.0	[2, 6]	120	1.39	0.80	0.09	4.19	0.72	20.0	0.18	4.03
256-8	256	$10^3$	8	10	1	10.0	[2, 6]	108	1.36	0.80	0.08	4.19	0.72	20.5	0.18	4.03

**Table 3.1** : Paramètres et valeurs caractéristiques de la turbulence des DNS de THI réalisées lors de l'étude.  $\Gamma$  représente l'intervalle temporel utilisé pour l'étude statistique et  $\langle \cdot \rangle_\Gamma$  représente la moyenne sur cet intervalle. Les échelles de longueurs  $L$ ,  $\lambda$ ,  $\eta$  sont calculées à partir du spectre moyenné  $\langle E(k) \rangle$ . Les échelles correspondantes calculées à partir du spectre  $E_\rho(k)$  d'énergie cinétique par unité de volume  $\rho \mathbf{u}^2$  ont des valeurs égales à celles présentées dans le tableau.

### 3.1 Méthode de forçage

Comme cela a été précédemment mentionné, l'étude de la dynamique turbulente à densité variable des petites échelles se fait principalement par le biais d'une approche statistique. Étant donné que les champs turbulents présentent des fluctuations, les statistiques sont obtenues en effectuant des moyennes temporelles sur les données provenant des DNS, afin de réduire la variance statistique. Cependant, cela suppose que les phénomènes étudiés soient statistiquement stationnaires. Il est important de noter que l'équation d'énergie de la turbulence, comme détaillée dans la section 1.3.1, ne présente plus de terme de production sous l'hypothèse d'isotropie. En conséquence, la turbulence isotrope est un processus instationnaire qui dissipe rapidement l'énergie cinétique de la condition initiale (en la transformant en énergie interne). Face à cette problématique, deux approches se présentent donc :

1. Étudier la dynamique de la turbulence en déclin. Les études statistiques peuvent alors être réalisées sur une fenêtre temporelle où le niveau d'énergie turbulent varie peu, de façon à supposer les phénomènes comme stationnaires. Cependant, cette approche présente une limitation significative en termes de nombres d'échantillons statistiques disponibles. De plus, cette méthode s'avère complexe à mettre en œuvre dans le cas de la turbulence à densité variable, notamment lorsque les nombres de Schmidt observés dans les rejets atmosphériques sont l'ordre de 1 [35]. En effet, dans une configuration à  $Sc = 1$ , le mélange se produit rapidement, ce qui rend difficile la sélection d'un intervalle pour l'analyse statistique, où l'écoulement maintient à la fois un fort gradient de densité et un comportement pleinement turbulent.
2. Utiliser une *méthode de forçage* qui injecte continuellement de l'énergie cinétique dans le système. Cette approche permet de maintenir une turbulence pleinement développée tout au long des simulations, évitant ainsi le déclin de l'énergie turbulente. En appliquant cette méthode de forçage, la turbulence peut être considérée comme statistiquement stationnaire, ce qui élimine la limitation du nombre d'échantillons statistiques induite par la dissipation turbulente. Cette seconde approche est qualifiée de simulation de THI forcée.

La méthode de forçage se révèle donc être le choix naturel pour cette étude. D'un point de vue modélisation, l'énergie injectée par la méthode de forçage peut être directement associée à l'énergie cinétique transmise par le jet d'émissions qui transitionne vers la THI.

Cette section présente le choix et le développement de la méthode de forçage utilisée pour les simulations à densité variable. La méthode implémentée s'inspire de la méthode de forçage linéaire dans l'espace physique proposée par LUNDGREN [55] et inclut une adaptation spécifique aux équations traitées ici, prenant en compte les variations de densité.

#### 3.1.1 Méthode de Lundgren

Depuis les travaux fondateurs de SIGGIA et PATTERSON [74], OVERHOLT et POPE [60], KERR [49] et ESWARAN et POPE [25], les méthodes de forçage sont largement utilisées pour les DNS de THI lors d'études fondamentales des statistiques des structures d'un écoulement turbulent. Les implémentations développées par les auteurs mentionnés précédemment permettent de prévenir le déclin de la turbulence en injectant de l'énergie dans les grandes structures tourbillonnaires à travers une zone étroite de l'espace spectral. Ces méthodes de forçage reposent sur la notion de cascade de KOLMOGOROV [50], selon laquelle les petites échelles turbulentes sont indépendantes du comportement aux grandes échelles.

Plus récemment, LUNDGREN [55] a introduit un terme de forçage dans l'espace physique où le terme source correspondant prend la forme  $\mathbf{f}_f = \mathbf{q}\mathbf{u}$ , analogue au terme de production d'énergie qui apparaît dans les écoulements cisailés. Cette approche injecte de l'énergie dans toutes les échelles de l'écoulement, contrairement aux méthodes de forçage spectral mentionnées précédemment, qui n'excitent que les plus grosses structures. Étant donné que les plus grandes échelles sont sujettes aux plus grandes fluctuations, elles sont les plus impactées par le terme source tandis que les plus petites échelles ne sont quasiment pas affectées [55, 14]. L'un des avantages de cette approche linéaire est sa facilité d'extension aux écoulements — compressibles ou incompressibles — à densité variable [14, 69]. CARROLL et BLANQUART [14] et JANIN

et al. [44] ont proposé des modifications à cette méthode afin de réduire les oscillations statistiques et de contrôler l'échelle intégrale. Malgré ces améliorations, ces nouvelles méthodes ajoutent également des paramètres de contrôle absent de notre jeu de données. En particulier, pour des écoulements à densité variable, ces modifications nécessiteraient des paramètres de contrôle supplémentaire dépendant du nombre de Schmidt  $Sc$ , du rapport de densité  $s$ , et de la condition initiale  $\rho_0(\mathbf{r})$  du champ de densité. Par conséquent, cette étude se base sur la méthode de Lundgren, qui est étendue aux équations de la dynamique avec diffusion de masse, afin de ne pas introduire de paramètre supplémentaire dans la modélisation.

Il est pertinent de noter que l'étude menée par LIVESCU et RISTORCELLI [52] sur la turbulence induite par effets de flottaison ne fait pas usage d'une méthode de forçage. En effet, dans cette configuration, la turbulence est générée par l'interaction entre le flux de masse et le gradient de pression induit par la flottaison. Cette approche est idéale pour étudier spécifiquement le phénomène de mélange. En revanche, dans cette étude, la méthode de forçage est privilégiée afin d'exciter directement les structures turbulentes et d'examiner leur interaction avec le champ de densité.

La section 1.3.1 présente en détail les équations d'évolution de l'énergie cinétique turbulente. Dans le cas à densité constante, le taux de variation de l'énergie cinétique turbulente par unité de masse est donné par l'expression suivante :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \right) dV = \int_{\Omega} \frac{1}{Re} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} dV + \int_{\Omega} q \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV. \quad (3.2)$$

Le coefficient de forçage  $q$  est ajusté de manière à atteindre un état statistiquement stationnaire qui garantit la conservation de l'énergie cinétique intégrée. À cet égard, il doit vérifier

$$\int_{\Omega} q \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV = - \int_{\Omega} \frac{1}{Re} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} dV \quad (3.3)$$

et s'exprime donc

$$q(\mathbf{u}) = - \frac{1}{Re} \frac{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} dV}{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV}. \quad (3.4)$$

Le terme de forçage étant proportionnel au champ de vitesse et étant la source initiale des perturbations, ce dernier doit être initialisé en début de simulations. Afin de garantir que les petites structures ne soient pas affectées par la condition initiale, une approche similaire à celle de KERR [49] est adoptée : la condition de vitesse  $\mathbf{u}_0$  force les modes de Fourier associées aux plus petits nombres d'onde avec une amplitude constante :

$$\mathbf{u}_0 = \mathcal{F}^{-1}(\hat{\mathbf{f}}), \quad \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{k}) = f_0, \quad \|\mathbf{k}\|_2 = 1 \quad (3.5)$$

avec  $f_0 = \frac{1}{4}$  de façon à ce que l'amplitude du champ de vitesse initiale soit de 1. Cette approche revient à injecter un spectre d'énergie, contenant de l'énergie uniquement dans les premiers modes. La condition de vitesse  $\mathbf{u}_0$  est ensuite projetée dans l'espace des vecteurs à divergence nulle de façon à respecter la contrainte d'incompressibilité.

En appliquant une méthodologie similaire, la méthode de Lundgren est étendue aux équations à densité variable par l'insertion de la relation  $\mathbf{f}_f = q \mathbf{u}$  dans l'équation (1.39) de l'énergie cinétique par unité de volume intégrée, permettant ainsi d'établir la condition de stationnarité énergétique

$$\int_{\Omega} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dV = - \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \zeta(\rho, \mathbf{u}) dV - \int_{\Omega} \frac{1}{2} \frac{1}{Re Sc} \mathbf{u}^2 \nabla^2 \rho dV. \quad (3.6)$$

Dans ce contexte, le coefficient de forçage  $q$  est maintenant une fonction de  $\rho$  et  $\mathbf{u}$  et s'exprime

$$q(\rho, \mathbf{u}) = - \frac{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot (\rho \zeta(\rho, \mathbf{u}) + (2 Re Sc)^{-1} \mathbf{u} \nabla^2 \rho) dV}{\int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV}. \quad (3.7)$$

Il est primordial de rappeler que cette section se concentre exclusivement sur la stationnarité énergétique globale et la stationnarité statistique des fluctuations turbulentes. L'écoulement, quant à lui,

n'est pas stationnaire en raison des effets de diffusion de masse et de son caractère turbulent. Grâce à cette approche de forçage, l'écoulement maintient une quantité d'énergie constante tout au long de la simulation. En ce qui concerne la turbulence, les fluctuations sont par définition non stationnaires. Cependant, selon la décomposition de Reynolds exposée dans la section 1.3.1, elles présentent des valeurs moyennes constantes au cours du temps. Quant aux effets de masse, l'écoulement devient complètement (statistiquement) stationnaire une fois que le mélange est complet et que le champ de densité devient uniforme. À ce stade, le champ de densité tend à être homogène, et on aboutit à une configuration classique de turbulence incompressible isotrope, dépourvue des effets à densité variable. Il est également important de noter que l'injection d'énergie par le processus de forçage accélère le mélange. En stimulant l'écoulement avec une quantité (contrôlée) d'énergie supplémentaire, le processus de mélange des différentes composantes fluides est intensifié, entraînant une augmentation de la dispersion et une meilleure homogénéisation du champ de densité.

L'accélération du processus de mélange par le forçage rend l'étude des phénomènes turbulents plus complexes au cours de ce laps de temps. Cependant, cette injection d'énergie est essentielle pour maintenir un état pleinement turbulent. Sans cette injection continue d'énergie, l'écoulement s'atténue et se stabilise éventuellement. De plus, comme mentionné auparavant, le forçage joue également un rôle crucial en permettant de modéliser l'énergie apportée par le jet d'émission responsable de la turbulence isotrope étudiée.

## 3.2 Méthodologie d'étude statistique

Comme exposé antérieurement, l'analyse de la dynamique turbulente s'effectue par le biais d'une analyse statistique visant à appréhender les caractéristiques moyennes des phénomènes fluctuants. En vue de mener une analyse statistique, un nombre approprié d'échantillons représentatifs est requis. Afin que le processus de moyenne soit cohérent, il est impératif que l'écoulement exhibe une forme de quasi-stationnarité statistique sur le segment temporel échantillonné. La stationnarité turbulente et énergétique est assurée par la méthode de forçage explicitée dans la section précédente. À présent, la préoccupation réside dans la sélection d'une condition initiale  $\rho_0(\mathbf{r})$  pour le champ de densité ainsi que dans la détermination d'un intervalle temporel adéquat en vue de mener l'étude statistique.

### 3.2.1 Initialisation à densité variable

La première étape consiste à sélectionner une condition initiale. Une condition initiale inhomogène pour le champ de densité doit être instaurée de manière à introduire les effets liés aux variations de masse. Cette condition initiale  $\rho_0(\mathbf{r})$  doit satisfaire les conditions d'isotropie et de périodicité. En ce sens, deux formes de champ sont envisagées :

1. Un profil « sinusoïdal »

$$\rho_0(\mathbf{r}) = \rho_0(x, y, z) = 1 + \frac{s-1}{s+1} \sin(x) \sin(y) \sin(z) \quad (3.8)$$

qui présente des oscillations entre les deux composantes, ce qui sous-entend que le processus de mélange a déjà été amorcé.

2. Un profil « sphérique » où la composante fluide la plus dense est confinée dans une sphère de volume  $\frac{1}{2}V$ , située au centre du domaine de simulation  $\Omega$  :

$$\rho_0(r) = 1 + \frac{s-1}{2} \left( 1 - \tanh \frac{r-r_0}{d} \right) \quad (3.9)$$

avec  $r = \|\mathbf{r}\|_2$  et  $r_0 = (3\pi^2)^{1/3}$ . Le paramètre  $d$  représente la longueur de la région de transition entre l'intérieur de la sphère et le fluide (léger) environnant. Entre d'autres termes, il s'agit de la taille caractéristique initiale des gradients de densité.

À ce stade, il convient de rappeler que le paramètre  $s$  correspond au rapport de densité entre les deux composantes fluides. Dans le cas de la sphère, il s'agit donc du rapport entre le fluide remplissant la sphère et le fluide l'entourant.

Au cours des essais de simulations menés à un nombre de Reynolds de 1000 et à un nombre de Schmidt de 1, il a été constaté que le profil sinusoïdal se dissipe bien plus rapidement que le profil sphérique. En d'autres termes, l'uniformisation du champ de densité s'effectue plus rapidement dans le cas du profil sinusoïdal, tendant ainsi vers un écoulement à densité constante en peu de temps. L'objectif primordial étant d'acquiescer un nombre maximal d'échantillons temporels, il est préconisé d'opter pour un profil qui présente une diffusion la plus lente possible. Naturellement, il est concevable de contourner cette limitation en réduisant le pas de temps pour accroître le nombre d'échantillons ou en augmentant le nombre de Schmidt pour ralentir le mélange. Cependant, de telles approches s'éloignent de la physique visée dans cette étude. De plus, en raison de sa forme en produits de sinus, le premier profil peut exciter les premiers modes de Fourier du champ de vitesse. Cet artefact pourrait alors introduire une corrélation  $\mathbf{u}-\rho$  susceptible de biaiser l'analyse. Pour ces raisons, le profil sphérique est choisi pour les simulations de cette étude. Une fois la sélection de la condition initiale  $\rho_0$  effectuée, il convient désormais d'initialiser les autres champs. À nouveau, deux approches se dessinent.

La première approche implique l'initialisation de la simulation à partir d'un état initial au repos associé à la condition initiale de la méthode de forçage décrite dans l'équation (3.5). Cette approche vise à engendrer et à maintenir les premiers tourbillons à grande échelle au sein d'un champ de densité inhomogène, de manière à forcer le développement de la turbulence. Cette méthode permet d'observer le développement de la turbulence dans un écoulement à densité variable. Son inconvénient est que le mélange se produit en parallèle du développement de la turbulence. Lors des essais à  $Re = 1000$ ,  $Sc = 1$  et  $s \in [2, 8]$ , le mélange s'homogénéise avant que la turbulence ne soit complètement développée. Ce qui revient à observer une turbulence pleinement développée dans un écoulement à densité constante. Une fois de plus, ce problème peut être contourné en augmentant le nombre de Schmidt. Cependant, cette approche n'est pas viable car elle éloignerait la modélisation du régime représentatif des rejets atmosphériques.

L'approche alternative permettant de s'affranchir de ce problème consiste à injecter la condition initiale de densité  $\rho_0$  au sein d'un écoulement turbulent déjà complètement développé. Pour ce faire, une simulation préliminaire de THI à densité constante est réalisée, avec le même nombre de Reynolds (et le même maillage). Les champs de vitesse et de pression finaux obtenus à l'issue de cette simulation préliminaire sont ensuite employés en tant que conditions initiales pour les simulations à densité variable. Cette approche ne permet pas d'explorer le développement de la turbulence dans un champ de densité inhomogène. Elle est néanmoins bien adaptée à l'objectif de cette étude, qui est d'analyser la dynamique des structures d'une turbulence pleinement développée au sein d'un écoulement caractérisé par des variations de densité. C'est en conséquence que cette approche est sélectionnée pour la mise en œuvre des simulations. En résumé, la démarche consiste à injecter un champ de densité inhomogène (où le fluide le plus dense est initialement confiné dans une sphère), au sein d'un écoulement déjà pleinement turbulent résultant d'une simulation à densité constante. Le maintien de la turbulence est assuré par la méthode de forçage discutée précédemment. Cette stratégie permet d'étudier la dynamique de la turbulence au sein d'un écoulement caractérisé par des variations de densité.

La figure 3.1 présente en vue de coupe l'évolution du champ de densité à différents instants après l'injection du profil initial à densité variable lors de la DNS 256-4. La figure illustre que la densité est rapidement équirépartie dans le domaine.

Dès l'instant  $t = T$  (où  $T \approx 2$  est le temps de retournement, voir équation (1.48)), la trace de la condition initiale n'est plus perceptible. À l'instant  $t = 5T$ , seule une petite zone de densité élevée (jaune) subsiste.

Il est à noter que des simulations ont également été conduites avec des rapports de densité inférieurs à 1 ( $s \in \{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\}$ ). Dans cette configuration, la composante fluide la moins dense se trouve confinée à l'intérieur de la sphère. Bien que ce paramètre ne soit pas représentatif des rejets atmosphériques lourds, cette configuration permet de vérifier l'existence d'une symétrie entre les dynamiques à  $s$  et  $s^{-1}$ . La figure 3.2 présente l'évolution du champ de densité à différents instants après l'injection du profil initial

à densité variable lors de la DNS 256-0.5. Tout comme dans le cas à  $s > 1$ , dès l'instant  $t = T$ , la trace de la sphère initiale a disparu.

L'évolution du champ de densité issue des autres simulations est présentée en annexe C.1.

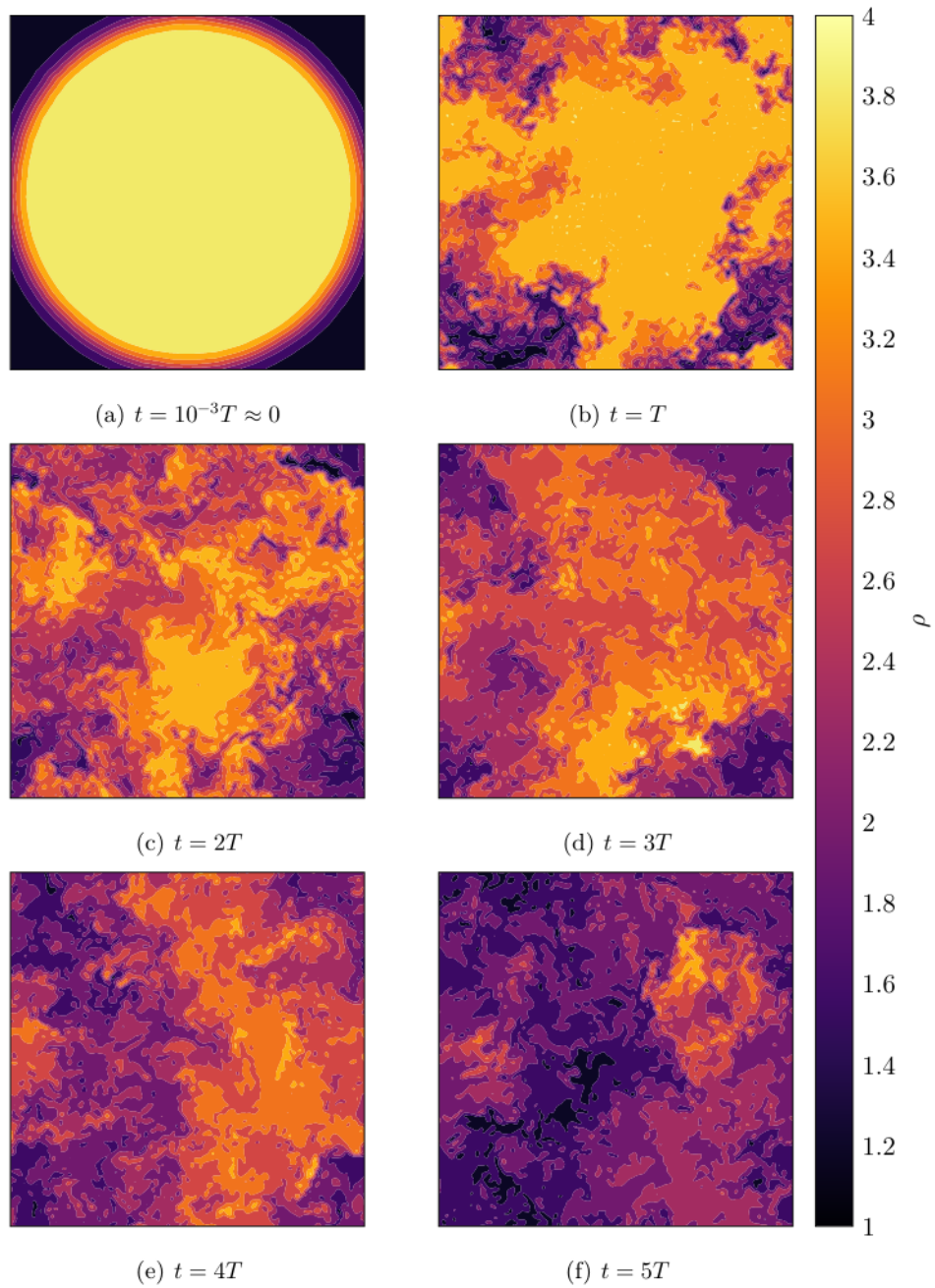
### 3.2.2 Sélection de l'intervalle d'étude

La deuxième étape consiste à sélectionner un intervalle temporel pour l'étude statistique. Conformément aux détails exposés précédemment, l'objectif est d'identifier un segment temporel où l'écoulement atteint un état de quasi-stationnarité statistique, permettant ainsi le calcul des moyennes des grandeurs physiques. Les effets de diffusion de masse doivent demeurer présents au sein de cette fenêtre temporelle. En d'autres termes, il est impératif de ne pas sélectionner un intervalle trop tardif au cours de la simulation. Dans le cas contraire, il y a un risque de se confronter à un mélange trop avancé, ce qui se traduirait par une réduction des effets de variations de masse.

La figure 3.3 présente l'évolution temporelle de diverses grandeurs liées à la turbulence au cours de la simulation 256-4. Ces grandeurs incluent l'énergie cinétique totale, le degré d'isotropie [18], le nombre de Reynolds basés sur l'échelle de Taylor  $Re_\lambda$ , l'écart type (en espace) du champ de densité  $\sigma(\rho)$ , l'asymétrie de la dérivée longitudinale de la vitesse  $S$  (« skewness » en anglais, dont l'expression est rappelée dans la section suivante) ainsi que le temps de retournement  $T$ . La méthode utilisée pour calculer le degré d'isotropie, basée sur les travaux de CURRY et al. [18], est détaillée en annexe D. D'une part, la figure démontre que le forçage de Lundgren adapté au cas à densité variable parvient à garantir la conservation de l'énergie cinétique totale et une isotropie très proche de l'unité.

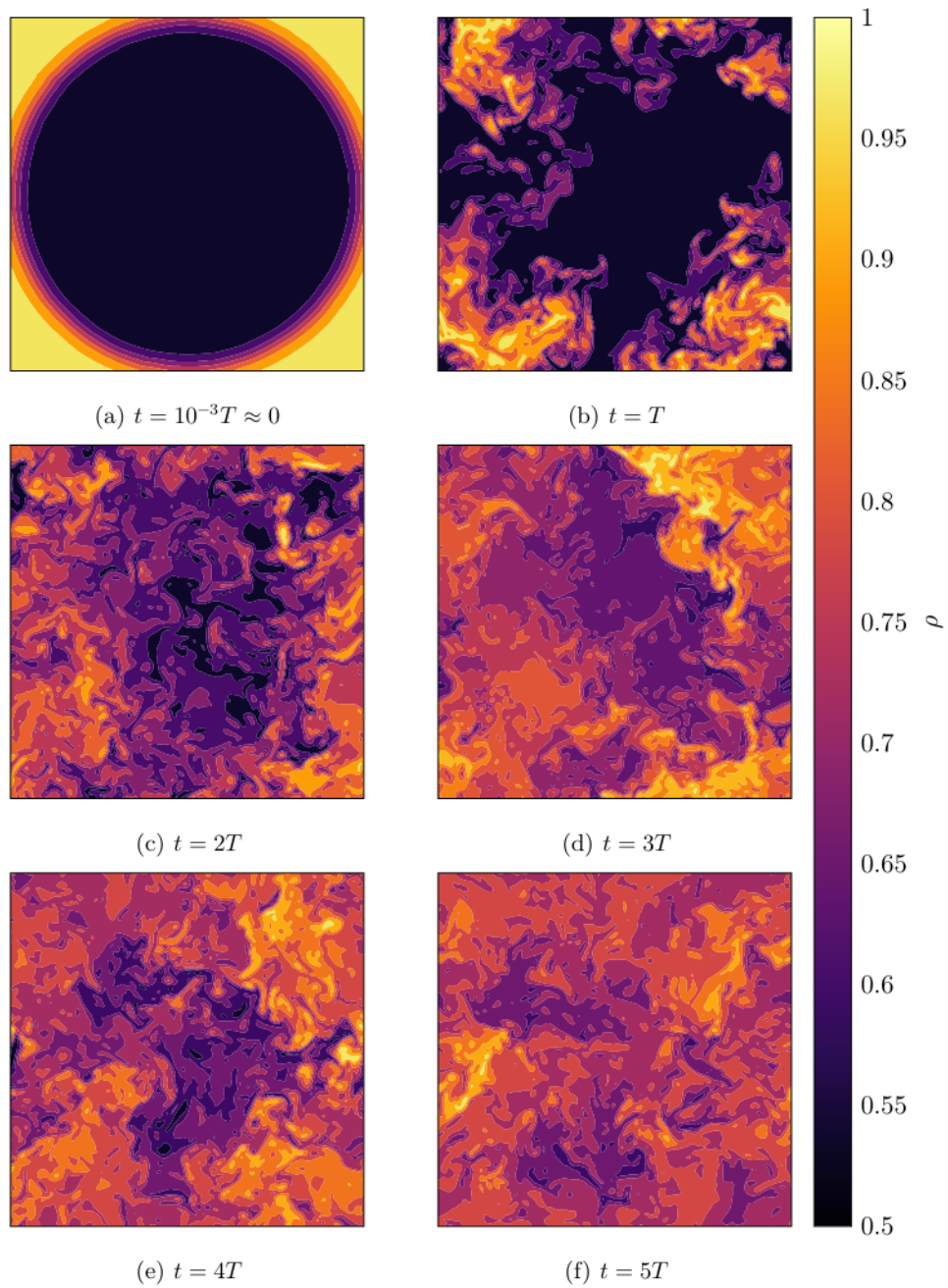
D'autre part, les courbes révèlent qu'il est possible de sélectionner un intervalle temporel spécifique d'environ 2 temps de retournement  $T$ , où le nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$  ainsi que le coefficient de skewness conservent une valeur quasi constante tandis que les effets de variation de masse demeurent significatifs. Sur la figure, cet intervalle temporel est délimité par des lignes verticales. Le nombre de Reynolds turbulent caractérise la dynamique turbulente aux petites échelles, tandis que le coefficient de skewness décrit la structure du champ de vitesse. Par conséquent, dans un intervalle où ces valeurs présentent peu de variations, l'écoulement peut être traité comme étant statistiquement stationnaire. Les fluctuations d'isotropie de l'ordre de quelques pourcents autour de 1 observées ne posent pas de problème, étant donné que cette grandeur est particulièrement sensible et qu'un écoulement est généralement considéré comme pleinement isotrope si son degré se situe entre 0.95 et 1.05 [18, 49]. Ainsi, cette fenêtre temporelle semble pertinente pour l'analyse statistique et est utilisée par la suite.

Ce segment temporel employé pour l'étude statistique est désigné par le symbole  $T$ . Étant donné que les nombres de Reynolds et de Schmidt sont identiques pour la plupart des simulations ( $Re = 1000$ ,  $Sc = 1$ ), les échelles temporelles caractéristiques demeurent similaires pour l'ensemble des simulations. Par conséquent, l'intervalle temporel choisi pour la simulation 256-4 peut être généralisé aux autres simulations. Toutefois, les bornes de cet intervalle pour chaque simulation sont explicitées dans le tableau 3.1 page 49.

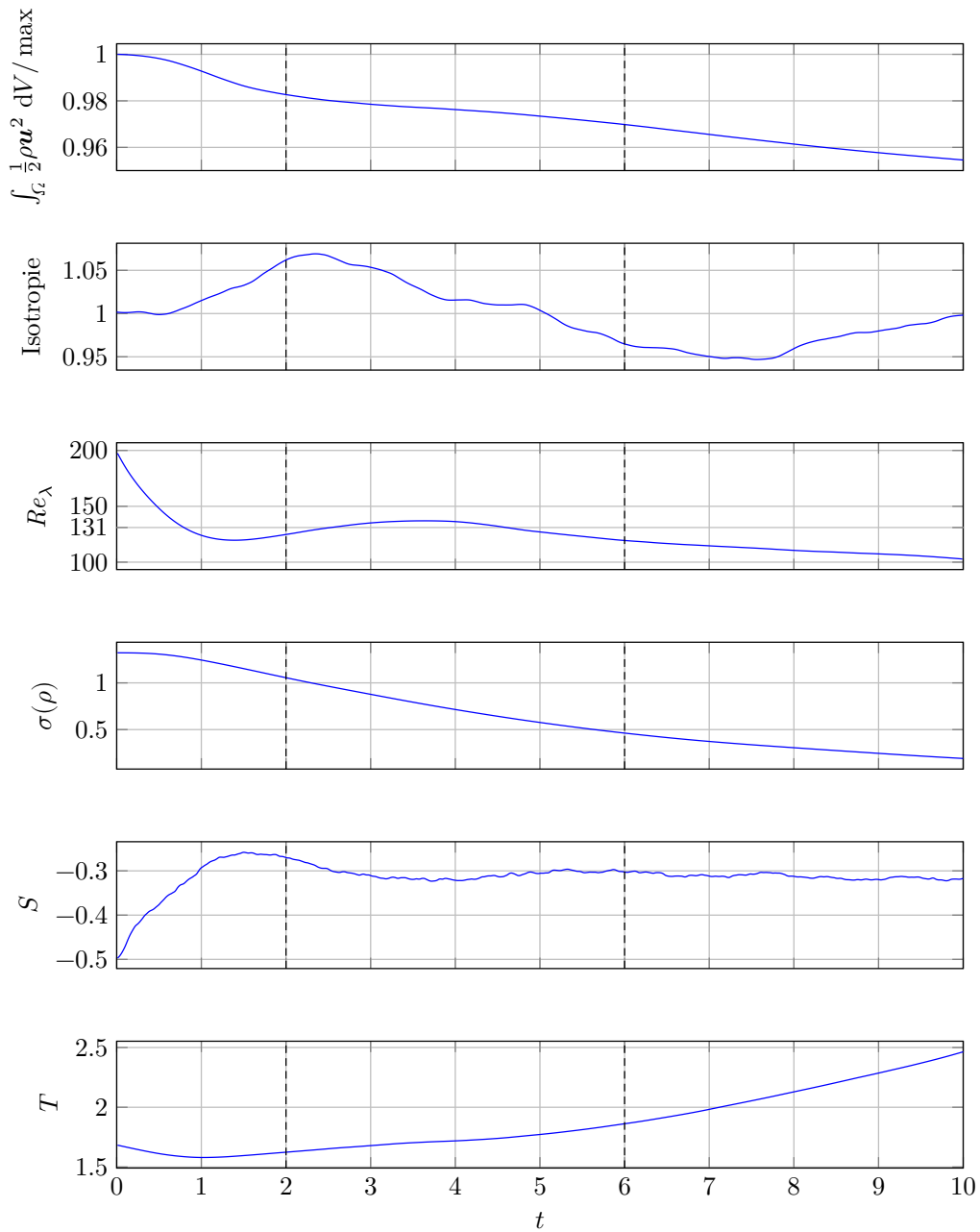


**Figure 3.1** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-4.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.





**Figure 3.2** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.5.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure 3.3** : Évolution de l'énergie cinétique, du degré d'isotropie ([18], annexe D), du nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor  $Re_\lambda$ , de l'écart type du champ de densité  $\sigma(\rho)$ , de l'asymétrie/skewness de la dérivée longitudinale de la vitesse  $S$ , ainsi que du temps de retournement des grands tourbillons  $T$ . Les données sont issues de la DNS 256-4 de THI à densité variable :  $Re = 1000$ ,  $s = 4$ ,  $Sc = 1$ ,  $N = 256$ . Les lignes verticales délimitent un intervalle de temps  $\Gamma$  correspondant à environ 2 temps de retournement  $T$ , pendant lequel les paramètres turbulents ne fluctuent pas significativement et où les effets de variation de masse demeurent substantiels. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

### 3.3 Analyse temporelle

Avant d'aborder l'étude statistique, il est pertinent de présenter quelques résultats issus de l'analyse de l'évolution temporelle de certaines grandeurs, notamment l'énergie cinétique et le champ de densité.

#### 3.3.1 Évolution temporelle de l'énergie cinétique

Dans un premier temps, une attention particulière est portée à l'évolution de l'énergie cinétique, succinctement discutée dans les commentaires de la figure 3.3. La figure 3.4 illustre cette évolution pour diverses simulations. Il est notable sur cette figure que, pour l'ensemble des simulations, une diminution d'énergie d'environ un pourcent par temps de retournement  $T \approx 2$  est observée. Cette décroissance négligeable valide l'aptitude de la méthode de forçage à préserver l'énergie. Les pertes minimales sont attribuables à la diffusion numérique du schéma d'intégration.

En ce qui concerne le niveau d'énergie, il est également pertinent d'examiner la quantité d'énergie injectée dans le système au fil de la simulation. La figure 3.5 présente l'évolution temporelle du coefficient de forçage de Lundgren  $q(\rho, \mathbf{u})$  lors des simulations. Un schéma de comportement similaire est identifiable dans toutes les simulations, bien que les fluctuations soient plus prononcées pour les rapports de densité élevés. Notamment, un pic d'injection d'énergie se manifeste en début de simulation. Une interprétation plausible de cette augmentation réside dans le fait qu'au début de la simulation, l'injection du champ de densité engendre un ralentissement des grandes structures. Ce ralentissement accélère le processus de cascade d'énergie et est compensé par le pic d'injection d'énergie. À mesure que le processus de mélange s'amorce, les interactions liées aux variations de densité se produisent à des échelles plus réduites. Cette transition vers des échelles plus fines occasionne un impact moindre sur les grands tourbillons porteurs de la majorité de l'énergie cinétique, ce qui réduit la nécessité d'une injection énergétique substantielle. Il est essentiel de noter qu'après le pic d'énergie, le coefficient tend vers une valeur constante, en particulier pour  $t > T$ . Cette stationnarité renforce davantage la pertinence du choix de l'intervalle d'étude  $\Gamma$  pour l'analyse statistique.

Étant donné que le terme de forçage émerge de l'intégration de plusieurs termes, il s'avère pertinent d'examiner la contribution individuelle de chaque terme au sein du processus d'injection d'énergie. Le coefficient de forçage s'exprime comme

$$q = -\frac{1}{Re} \frac{\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \dot{\omega} \, dV}{\int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \, dV} \quad (3.10)$$

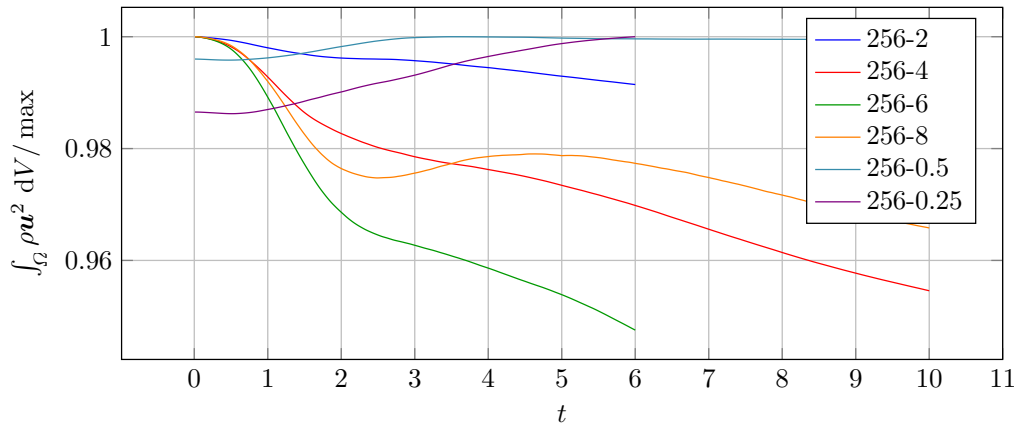
où

$$\dot{\omega} = \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Sc} \left( (\nabla \rho + \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \nabla \rho + \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \rho \right). \quad (3.11)$$

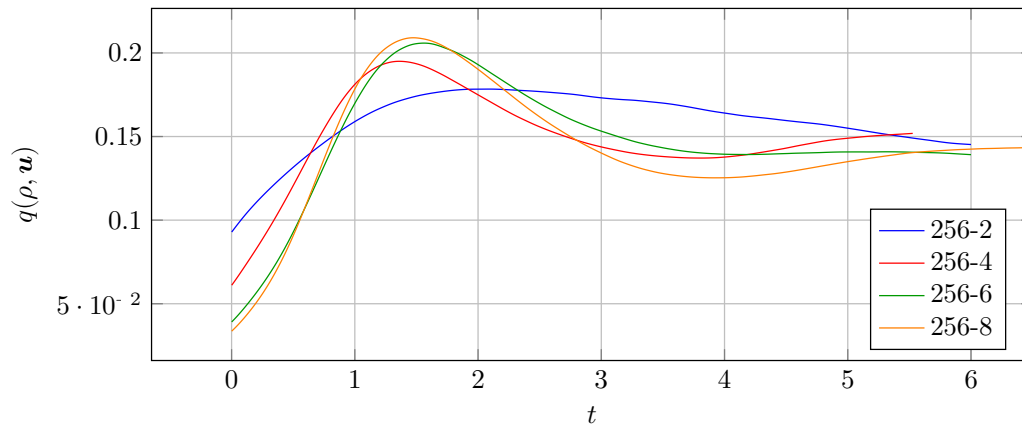
La figure 3.6 illustre la contribution (valeur absolue de l'intégrale sur le volume) de chacun des quatre termes de  $\dot{\omega}$  durant la simulation 256-8. Il est observé que le terme relié à la diffusion visqueuse présente une contribution qui dépasse de deux ordres de grandeur les autres. Il en découle que c'est ce phénomène qui gouverne la dynamique énergétique du système. Un comportement analogue est constaté dans les simulations à d'autres rapports de densité. Par conséquent, les termes additionnels de l'équation de quantité de mouvement introduits par les effets de diffusion de masse se manifestent davantage comme des mécanismes de transfert d'énergie plutôt que comme des termes de diffusion.

En dernier lieu, le paramètre dont l'évolution temporelle mérite examen est le nombre de Reynolds  $Re_{\lambda}$  basé sur l'échelle de Taylor. Comme explicité en détail dans la section suivante, ce paramètre joue un rôle crucial dans l'analyse de la turbulence, étant intégré dans diverses lois d'échelle [49, 46, 41]. La figure 3.7 dépeint l'évolution de ce nombre de Reynolds turbulent au cours des différentes simulations. L'évolution au cours de la simulation à densité constante 256-1, utilisée pour établir la condition initiale turbulente, est également présentée à titre de comparaison. Cette figure renforce l'idée d'utiliser l'intervalle temporel  $\Gamma$  pour l'analyse statistique en démontrant que toutes les simulations y présentent peu de fluctuations en  $Re_{\lambda}$ .

De plus, il est à noter que l'introduction des effets de variation de densité dans l'écoulement influe directement sur ce nombre de Reynolds. Ce dernier décroît avec le rapport de densité  $s$ . Puisque le



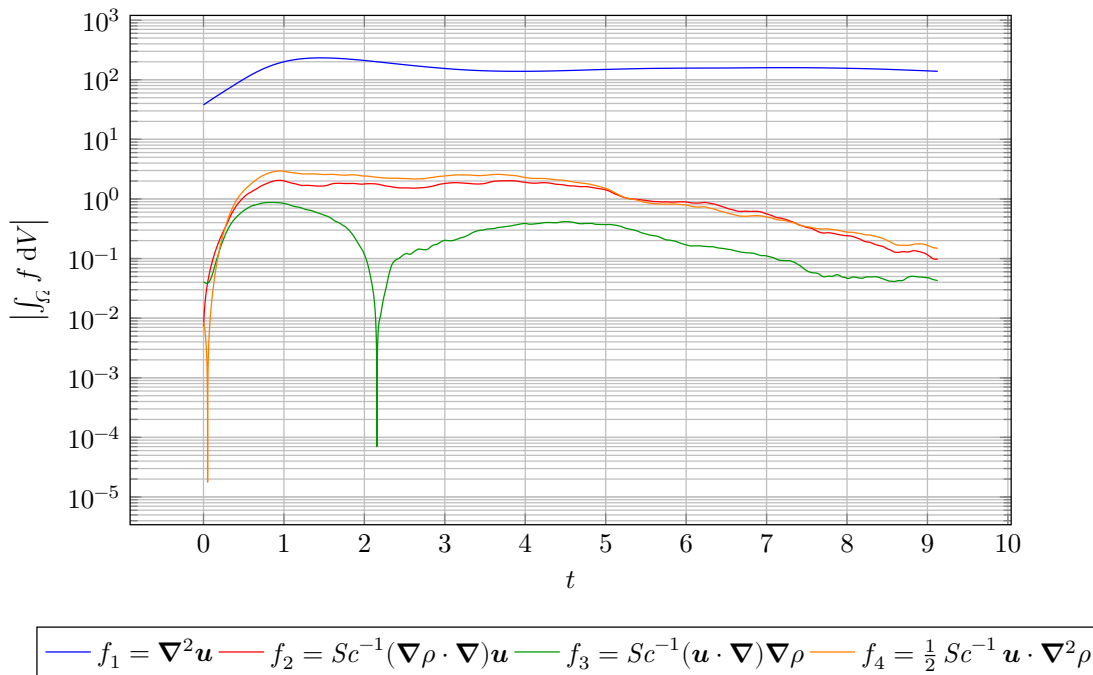
**Figure 3.4** : Évolution de l'énergie cinétique intégrée lors des DNS de THI à densité variable. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



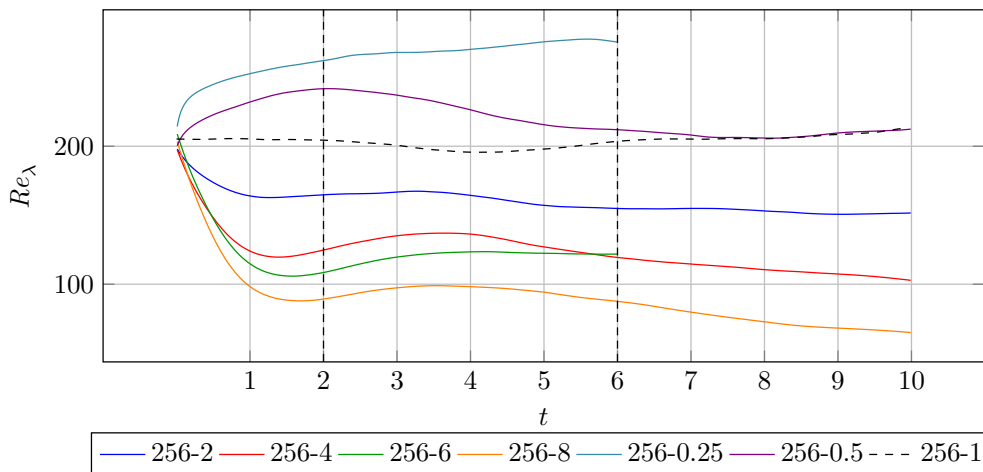
**Figure 3.5** : Évolution du coefficient de forçage de Lundgren  $q$  lors des DNS de THI à densité variable. Le coefficient est défini dans l'équation (3.7) page 51. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

nombre de Reynolds turbulent intervient dans les lois d'échelles de la turbulence à densité constante, il est prévisible que cette modification affecte les structures turbulentes à densité variable. Dans le cas de la simulation à  $s = 0.5$ , le nombre de Reynolds turbulent augmente avant de converger vers la valeur observée dans le cas  $s = 1$ . Cette dynamique diverge des cas où  $s > 1$ , où  $Re_{\lambda}$  ne converge pas vers la courbe à densité constante à la fin de la simulation. Il semble donc que dans le cas où  $s < 1$ , l'introduction du champ inhomogène de densité influence peu la dynamique turbulente.

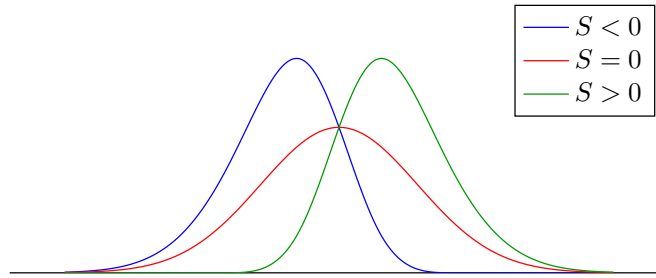
Cette analyse temporelle préliminaire de l'énergie met en évidence que malgré la prédominance énergétique du terme de diffusion visqueuse, l'incorporation du champ de densité inhomogène dans l'écoulement altère son comportement énergétique. Notamment, le nombre de Reynolds turbulent  $Re_{\lambda}$  subit un impact significatif. Cette modification de comportement sous-entend une altération de la dynamique des structures, un aspect qui est l'objet de l'étude statistique de la section suivante.



**Figure 3.6** : Évolution des contributions des termes du coefficient de forçage lors de la DNS de THI à densité variable 256-8. La contribution est calculée en prenant la valeur absolue de l’intégrale sur l’intégralité du domaine de calcul du terme en question. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure 3.7** : Évolution du nombre de Reynolds basé sur l’échelle de Taylor  $Re_\lambda = (\lambda/L) Re$  lors des DNS de THI à densité variable. Pour comparaison, la ligne en pointillés représente l’évolution tout au long de la simulation à densité constante 256-1 pour  $t \in [40, 50]$ . Les lignes verticales délimitent l’intervalle de temps  $\Gamma$  utilisé pour l’étude statistique de ces simulations. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure 3.8** : Illustration du coefficient de skewness d’une distribution. Les courbes sont tracées à partir de la « approximate skew normal distribution » proposée par ASHOUR et ABDEL-HAMEED [3].

### 3.3.2 Mélange du champ de densité

L’introduction d’un champ de densité inhomogène dans un écoulement turbulent induit son mélange, catalysé par les tourbillons. Les Probability Density Function (PDF, *Fonction de Densité de Probabilité*) peuvent être utilisées pour caractériser l’état du mélange ainsi que son évolution. Spécifiquement, les écarts par rapport à un comportement gaussien dans les PDF permettent de mettre en évidence des asymétries dans le processus de mélange. Pour rappel, une PDF est considérée comme gaussienne lorsqu’elle présente une forme en cloche centrée autour de la moyenne  $\bar{x}$  et s’exprime sous la forme d’une distribution gaussienne

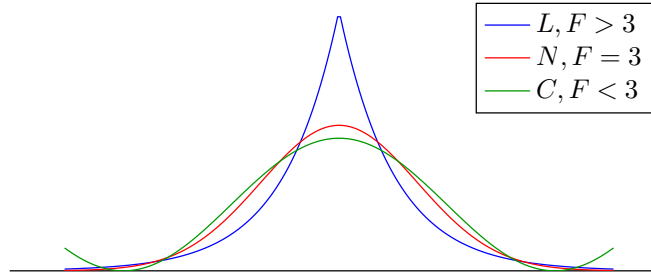
$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x - \bar{x}}{\sigma}\right)^2\right) \quad (3.12)$$

où  $\sigma$  est l’écart type, qui mesure la dispersion des valeurs par rapport à la moyenne. Plus  $\sigma$  est grand, plus la cloche est large et étalée. Un écart par rapport au comportement gaussien se produit alors lorsque les ailes de la PDF s’écartent ou se referment par rapport à la cloche gaussienne et/ou lorsque la courbe perd sa symétrie. L’écart par rapport au comportement gaussien peut être quantifié à l’aide des coefficients d’asymétrie (skewness) et d’aplatissement (flatness, kurtosis) de la distribution de données.

Le coefficient de « skewness »  $S$ , également connu sous le nom de coefficient d’asymétrie, est une mesure statistique utilisée pour évaluer l’asymétrie ou la forme de la distribution d’un ensemble de données. Pour  $S > 0$ , la distribution est positivement asymétrique, ce qui signifie qu’elle est étirée vers la gauche et que la queue de la distribution est plus longue du côté droit. Pour  $S < 0$ , la distribution est négativement asymétrique, ce qui signifie qu’elle est étirée vers la droite et que la queue de la distribution est plus longue du côté gauche. Pour  $S = 0$ , la distribution est approximativement symétrique et est proche d’un comportement gaussien, bien que cela ne garantisse pas une symétrie parfaite. La figure 3.8 illustre la signification du coefficient d’asymétrie.

Le coefficient de « flatness », également connu sous le nom de coefficient d’aplatissement ou de kurtosis, est une mesure statistique qui évalue la forme de la distribution d’un ensemble de données en se concentrant sur l’importance des queues et des pics par rapport à la distribution normale (gaussienne). Contrairement au coefficient de skewness qui mesure l’asymétrie, le flatness se concentre sur la présence ou l’absence de pics prononcés et de queues épaisses dans la distribution. Pour  $F > 3$ , la distribution a une forme plus étroite et pointue que la distribution normale. Cela indique la présence d’un pic plus prononcé et d’une queue plus étroite que celles d’une distribution normale. Pour  $F < 3$ , la distribution a une forme plus large et aplatie que la distribution normale. Cela indique une dispersion plus importante des valeurs et une queue plus épaisse que la loi gaussienne. Pour  $F = 3$ , la distribution a la même forme que la distribution normale en termes d’aplatissement et de taille de queue. C’est la valeur d’aplatissement attendue pour une distribution normale. La figure 3.9 illustre la signification du coefficient d’aplatissement.

La figure 3.10 présente les PDF du champ de densité à différents instants sélectionnés pour diverses simulations. Les PDF commencent sous la forme d’un double pic symétrique, correspondant à deux fluides purs au départ, reliés par la zone de transition. À mesure que les fluides commencent à se



**Figure 3.9** : Illustration du coefficient de flatness d'une distribution où  $L$  est une loi de Laplace,  $N$  une loi normale (gaussienne), et  $C$  est une loi de cosinus surélevé. Toutes les distributions ont une moyenne et un skewness nuls. Les paramètres sont fixés de façon à ce que les variances soient de 1.

mélanger lors de la simulation, les PDF deviennent asymétriques. Un étirement progressif de la cloche vers la gauche est perceptible, ce qui traduit une asymétrie positive. Cela révèle que la composante fluide plus dense se mélange plus rapidement que la composante moins dense. Ce comportement est également observé dans les simulations de turbulence entraînée par des effets de flottaison réalisées par LIVESCU et RISTORCELLI [52, figure 4]. Il convient également de noter que les différences entre les différents rapports de densité  $s$  sont minimes, en particulier l'asymétrie ne s'accroît pas avec l'augmentation de  $s$ . Cette asymétrie est corroborée par le coefficient de skewness

$$S_\rho = \frac{\langle \rho^3 \rangle_\Omega}{\langle \rho^2 \rangle_\Omega^{3/2}}, \quad (3.13)$$

qui demeure positif tout au long de la simulation comme illustré sur la figure 3.11. L'évolution de  $S_\rho$  révèle que l'asymétrie diminue au fur et à mesure du mélange. Cependant, en fin de simulation, il semble atteindre un plateau, avec un coefficient d'asymétrie d'environ 1, ce qui demeure éloigné d'un comportement gaussien, caractérisé par un coefficient nul.

L'évolution du coefficient de flatness

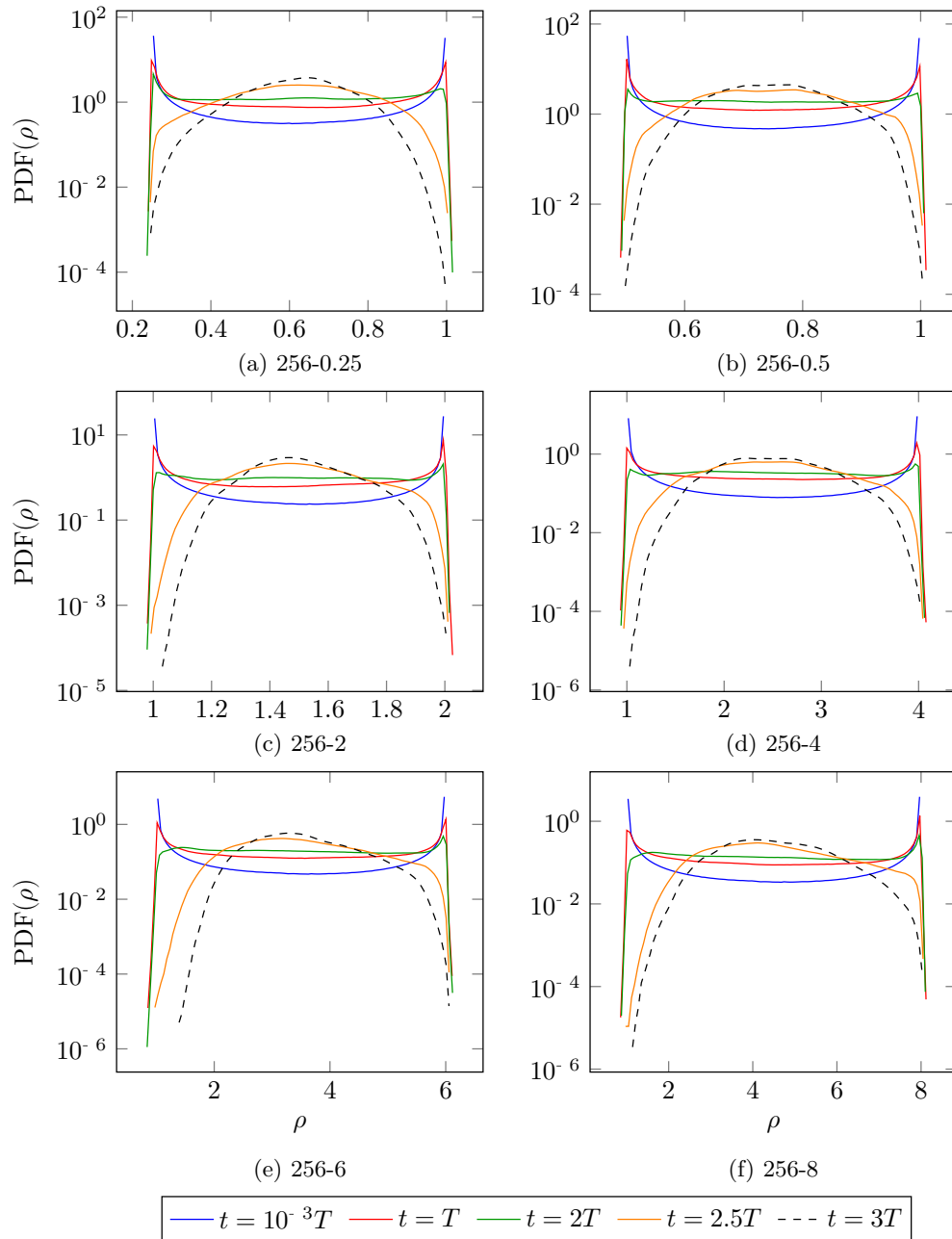
$$F_\rho = \frac{\langle \rho^4 \rangle_\Omega}{\langle \rho^2 \rangle_\Omega^2}, \quad (3.14)$$

également présentée dans la figure 3.11, démontre un écart progressif par rapport au comportement gaussien ( $F = 3$ ) à mesure que le mélange progresse. Cependant, il est difficile de tirer des conclusions spécifiques de cette observation, à part le fait que le mélange engendre une distribution étendue des valeurs de densité.

Le mélange peut également être caractérisé par les PDF du gradient du champ de densité. Les figures 3.12 et 3.13 présentent les PDF de la dérivée longitudinale  $\partial\rho/\partial x$  et transversale  $\partial\rho/\partial y$  du champ de densité, respectivement. Initialement, le champ de densité inhomogène est composé de régions de fluides purs, où les dérivées directionnelles de la densité sont nulles, à l'exception de la zone de transition entre les deux régions. Cela se traduit par une PDF dans laquelle les valeurs proches de zéro ont la fréquence la plus élevée, tandis que les valeurs de grande amplitude se produisent avec une faible fréquence. Lors des premiers instants de la simulation, la PDF s'élargit en raison de l'apparition de multiples zones de mélange à des échelles plus petites. Cet élargissement suggère notamment que les effets à densité variable sont rapidement transportés à de plus petites échelles lors du mélange. Par la suite, au fil du temps, les PDF se réduisent en largeur à mesure que les gradients se dissipent progressivement par diffusion.

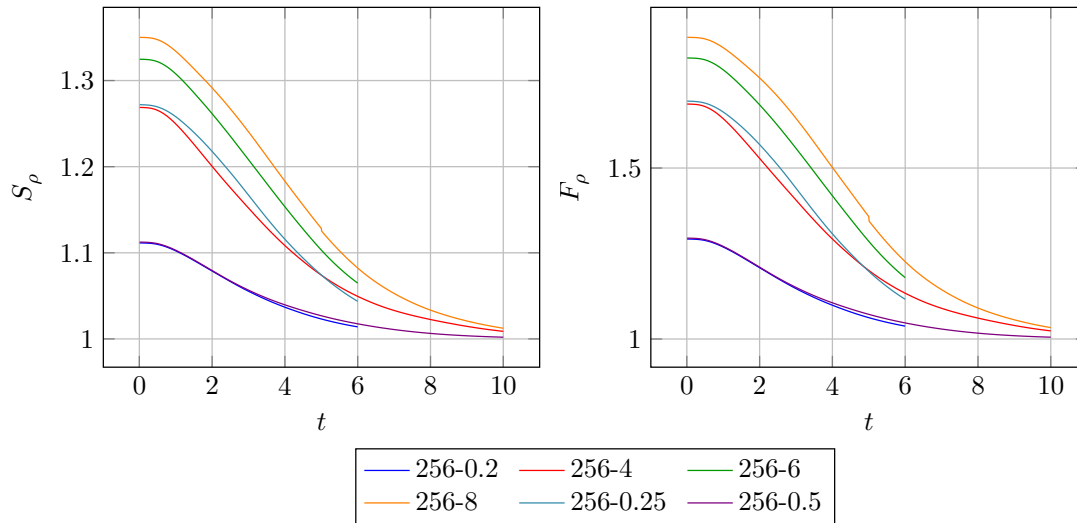
Il est à noter que la distribution des gradients est symétrique. Cette dynamique pleinement isotrope se distingue de celle observée par LIVESCU et RISTORCELLI [52, figure 10], où les PDF de la dérivée dans la direction des effets de flottaison présentent une asymétrie. Il est également important de noter que le rapport de densité  $s$  n'a pas d'influence sur la distribution des gradients, à l'exception de la production de gradients plus intenses.

En résumé, l'étude temporelle présentée dans cette section a mis en évidence deux points importants :



**Figure 3.10** : Évolution de la PDF du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.





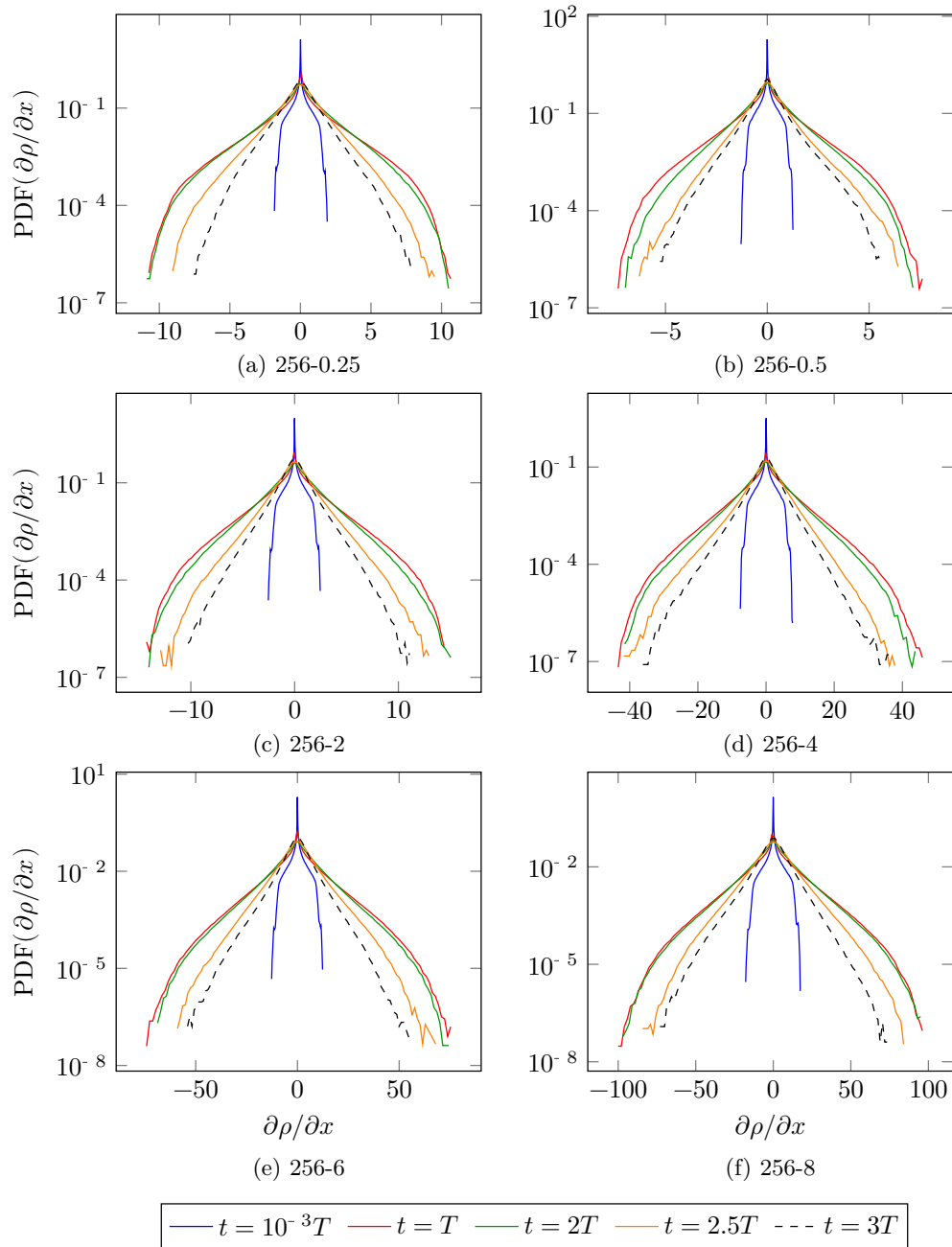
**Figure 3.11** : Évolution des moments du champ de densité lors des DNS de THI à densité variable : (haut) skewness défini dans l'équation (3.13) ; (bas) flatness défini dans l'équation (3.14). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

- L'introduction d'un champ de densité inhomogène dans un écoulement turbulent modifie le nombre de Reynolds turbulent de l'écoulement. Cette modification suggère une modification des échelles turbulentes et, par conséquent, une modification du comportement aux petites échelles.
- Le mélange du champ inhomogène présente une légère asymétrie, avec un mélange plus rapide de la composante fluide la plus dense. De plus, le processus de mélange entraîne une distribution des gradients sur une large gamme d'échelles, transportant ainsi les effets à densité variable aux petites échelles.

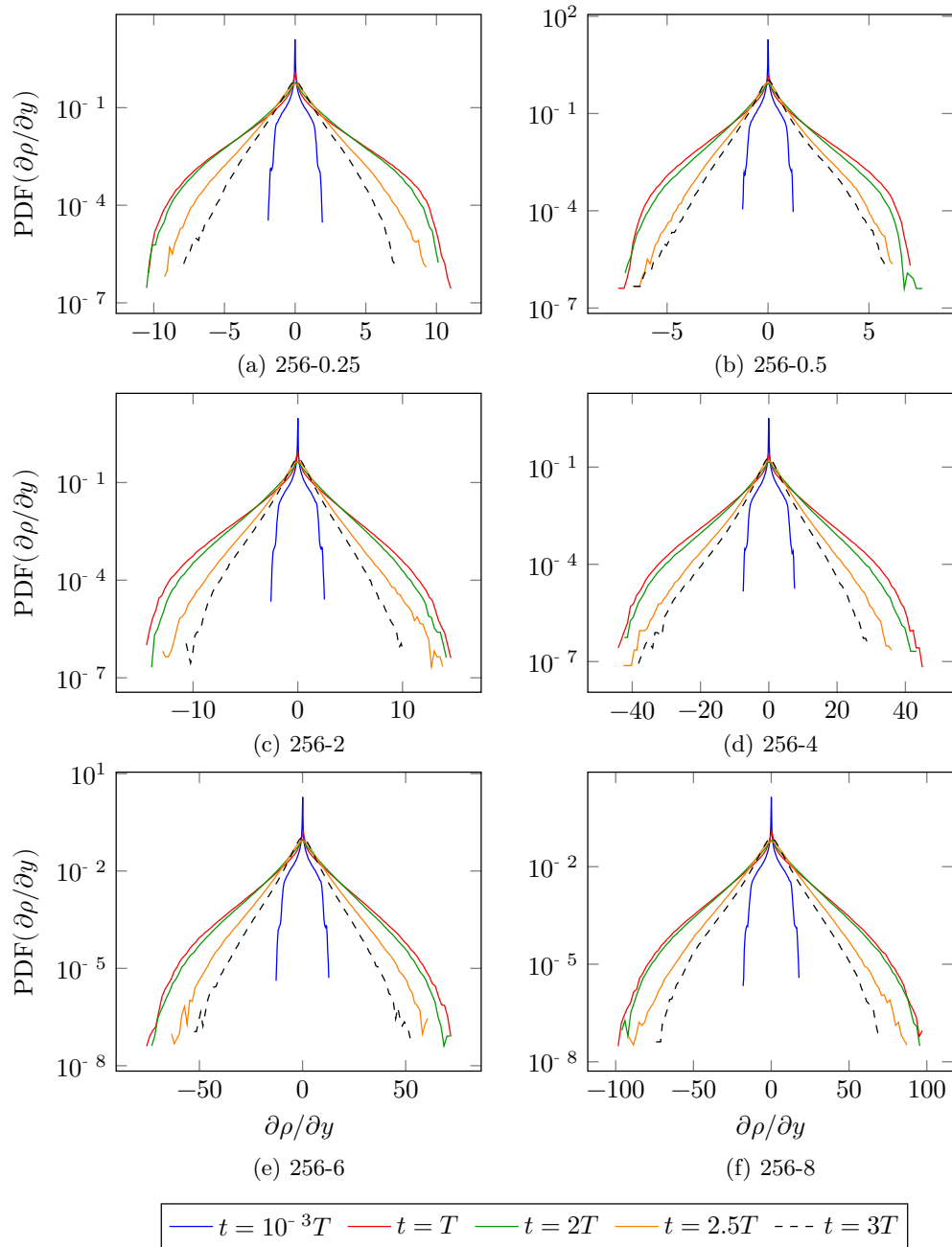
### 3.4 Analyse statistique

La turbulence est caractérisée par une fluctuation irrégulière et abrupte de l'intensité des grandeurs physiques de l'écoulement [45]. Ce phénomène, souvent désigné sous le terme d'intermittence, incarne l'essence du chaos inhérent aux écoulements turbulents. Il se manifeste par des variations brusques et marquées des grandeurs, lesquelles se traduisent par des régions où les fluctuations sont marquées contrastant avec d'autres où elles sont atténuées. Cette manifestation se déploie non seulement dans l'espace, mais également à travers le temps [41]. L'intermittence représente un pilier fondamental de la complexité inhérente à la turbulence, et elle est profondément liée à la genèse et à la dissipation des structures tourbillonnaires qui émergent à diverses échelles spatiales et temporelles.

Cette étude est dédiée à l'analyse statistique des petites structures de la turbulence isotrope à densité variable, en particulier à travers la quantification de l'intermittence spatiale et temporelle au moyen de PDF. Elle tire son inspiration des travaux de JIMÉNEZ et al. [46] et ISHIHARA et al. [41], qui explorent la dynamique des structures à petite échelle de la THI à densité constante, en se penchant sur leur intermittence via des analyses statistiques. En particulier, ils explorent la dépendance en  $Re_\lambda$  des PDF et des moments du champ de vitesse et de ses gradients. L'analyse temporelle présentée précédemment a mis en évidence l'impact de l'introduction du champ de densité inhomogène sur le nombre de Reynolds turbulent, laissant ainsi présager une altération de ces caractéristiques du champ de vitesse.



**Figure 3.12** : Évolution de la PDF de la dérivée longitudinale du champ de densité  $\partial\rho/\partial x$  lors des DNS de THI à densité variable. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure 3.13** : Évolution de la PDF de la dérivée transverse du champ de densité  $\partial\rho/\partial y$  lors des DNS de THI à densité variable. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

### 3.4.1 Analyse statistique des fluctuations de vitesse

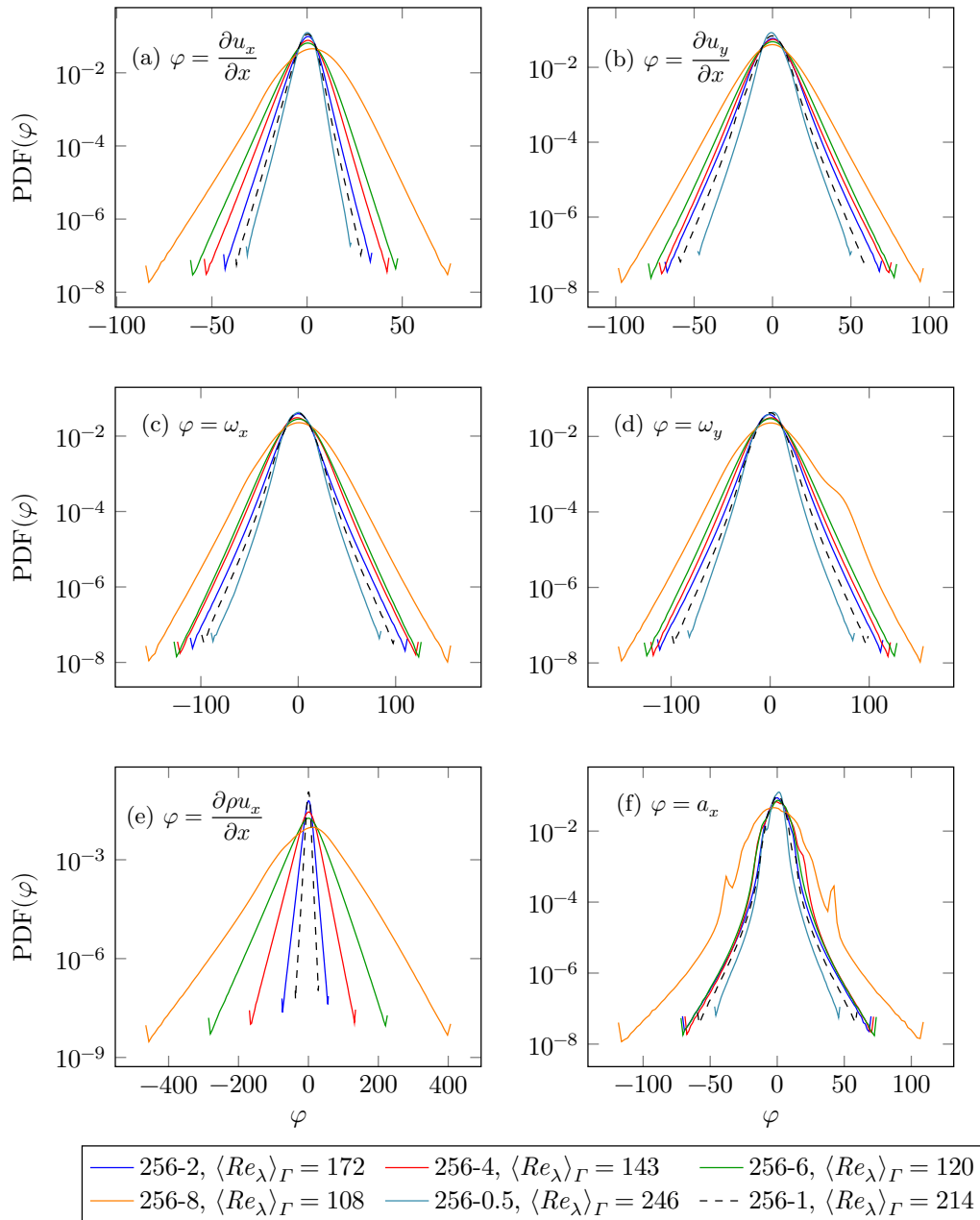
L'intermittence de la turbulence à petite échelle exige que les PDF présentent des queues évasées [75]. Plus précisément, JIMÉNEZ et al. [46], GOTOH, FUKAYAMA et NAKANO [32] et ISHIHARA et al. [41] démontrent que dans les écoulements à densité constante, les PDF des gradients de vitesse  $\partial u_x/\partial x$ ,  $\partial u_y/\partial x$  et des composantes de vorticit   $\omega_x$ ,  $\omega_y$  deviennent de plus en plus non gaussiennes et pr sentent des queues  vas es   mesure que le nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$  augmente. L' largissement des PDF en fonction du nombre de Reynolds turbulent est le r sultat d'une distribution plus  tal e des valeurs, ce qui refl te une augmentation marqu e du ph nom ne d'intermittence.

Les figures 3.14 et 3.15 pr sentent les PDF de la d riv e longitudinale du champ de vitesse  $\partial u_x/\partial x$ , de la d riv e transversale du champ de vitesse  $\partial u_y/\partial x$ , des composantes de vorticit   $\omega_x$  et  $\omega_y$ , de la d riv e longitudinale de la quantit  de mouvement  $\partial \rho u_x/\partial x$ , ainsi que de la composante d'acc l ration lagrangienne  $a_x \equiv (\partial/\partial t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)u_x)$  pour les diff rentes simulations r alis es, associ es aux diff rentes valeurs de  $s$  consid r es dans cette  tude. Pour chaque variable, la courbe correspondant   la simulation pr liminaire   densit  constante est trac e en pointill s pour comparaison. Conform ment   la discussion sur l'intervalle d'analyse statistique de la section 3.2, les PDF sont moyenn es sur environ 500 pas de temps de l'intervalle temporel  $\Gamma$ . Plus pr cis ment, la figure 3.14 pr sente les PDF non normalis es, et la figure 3.15 pr sente les PDF normalis es par l' cart type de chaque grandeur  $\varphi$ . Dans cette seconde figure,  $\sigma(\varphi)$  PDF  $\varphi$  est trac e en fonction de la distribution des valeurs de  $\varphi/\sigma(\varphi)$ . La visualisation des PDF non normalis es permet de caract riser la r partition de structures de diff rentes tailles au sein de l' coulement. En revanche, les PDF normalis es servent    valuer si les ph nom nes observ s pr sentent une propri t  d'autosimilarit .

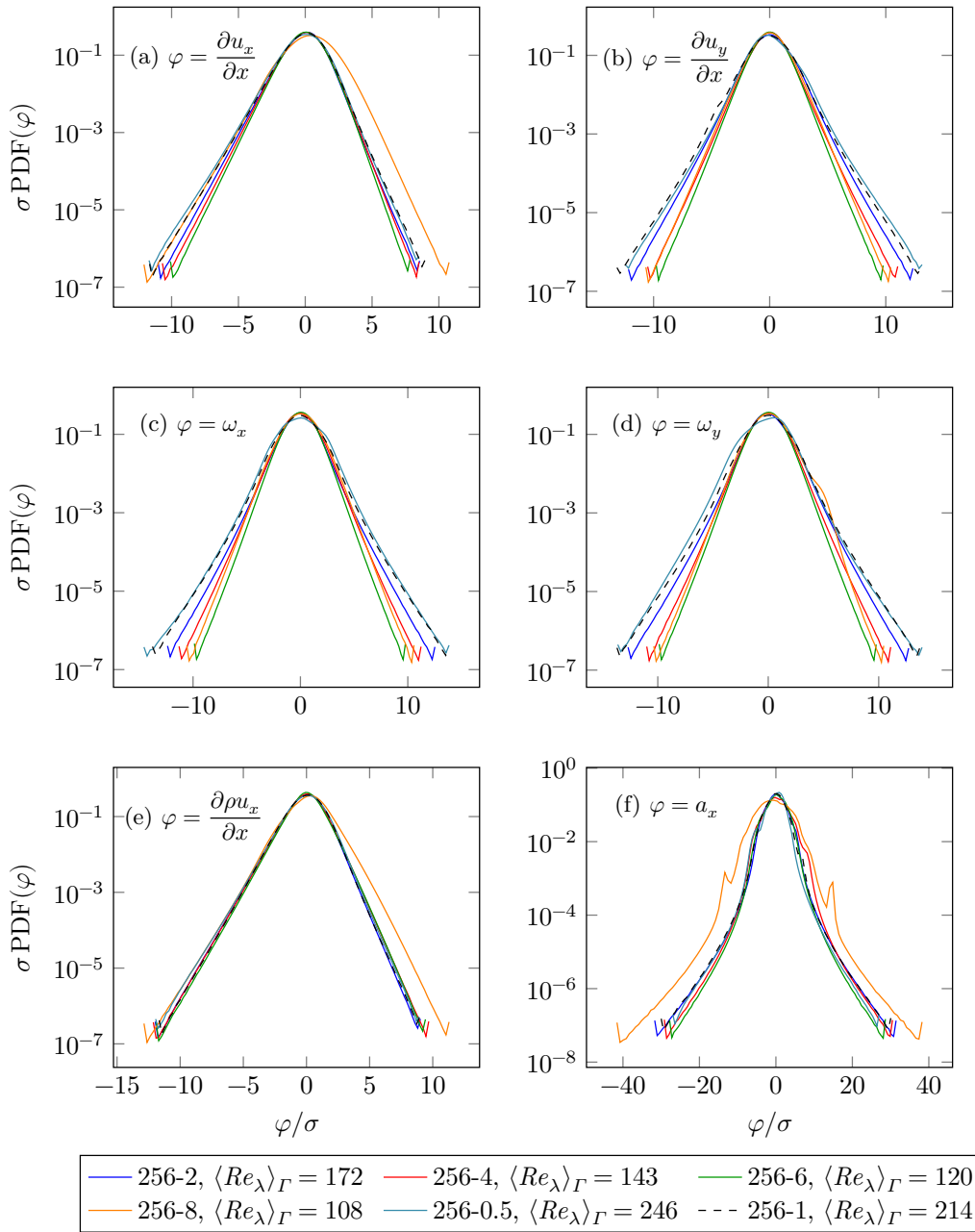
Dans la figure 3.14, toutes les PDF (non normalis es) des  coulements   densit  variable pr sentent des ailes larges, qui s' cartent davantage pour des valeurs plus  lev es de  $s$ . Cela sugg re qu'  mesure que  $s$  augmente, l' nergie est transf r e vers des tourbillons de plus petites  chelles qui pr sentent des gradients de vitesse  lev s. Ce ph nom ne est observ  dans les  coulements   densit  constante lors d'une augmentation du nombre de Reynolds. Cependant, ici, il est observ  suite   l'introduction d'un champ de densit  inhomog ne sans augmentation de  $Re$ , mettant en  vidence un changement de dynamique, li  aux effets   densit  de variable. Cependant, l'augmentation de  $s$  entra ne une diminution de  $Re_\lambda$ . Les effets de masse semblent ainsi contrebalancer cette r duction en g n rant et en transf rant de l' nergie vers les plus petites  chelles. Ce m canisme complexe contribue   maintenir une certaine dynamique turbulente et    viter une diminution excessive de l'intermittence, m me lorsque  $Re_\lambda$  diminue. La PDF de la d riv e longitudinale de la quantit  de mouvement  $\partial \rho u_x/\partial x$  (figure 3.14, panneau (e)) pr sente un  cartement plus important en fonction de  $s$  que celle de  $\partial u_x/\partial x$ . Cette observation renforce l'id e que le processus de m lange engendre une m canique de transfert d' nergie vers les plus petites  chelles.

Dans la figure 3.15, les PDF normalis es de  $\partial u_x/\partial x$  (panneau (a)) et de  $\partial \rho u_x/\partial x$  (panneau (e)) ne pr sentent pas d' largissement des ailes pour  $s \leq 4$ . Dans ce cas, les diff rences observ es pour les petites  chelles, c'est- -dire les gradients de vitesse  lev s, devraient  tre principalement attribu es   un effet de nombre de Reynolds. Pour  $s = 8$ , la PDF devient sym trique et pr sente une queue  vas e. Cela semble indiquer que l'intermittence   petite  chelle reste inchang e par les effets de variation de masse jusqu'  une valeur seuil de  $s$  entre 4 et 8, en tenant compte de nos param tres de contr le. Au-del  de ce seuil, l' largissement des PDF refl te une augmentation de l'intermittence   petite  chelle de  $\partial u_x/\partial x$ . L'intermittence de la d riv e de la vitesse transversale et des composantes de vorticit  reste inchang e, ind pendamment du rapport de densit , comme illustr  dans les panneaux (b)   (f) de la figure 3.15.

ISHIHARA et al. [41] d montrent que l'intermittence de la turbulence se manifeste non seulement dans l'espace, mais aussi   travers le temps. Cela signifie que les fluctuations turbulentes ne se manifestent pas uniquement dans les gradients spatiaux de vitesse, mais aussi dans les d riv es temporelles du champ de vitesse. Dans la figure 3.15(f), la PDF de l'acc l ration lagrangienne  $a_x$  pr sente un comportement similaire   celui de  $\partial u_x/\partial x$  : pour des valeurs de  $s$  inf rieures ou  gales   4, les PDF ne pr sentent pas d' largissement significatif, et pour  $s = 8$ , la PDF devient plus large et plus sym trique. Ainsi,   la fois l'intermittence spatiale et temporelle ne semblent pas affect es par les effets de la densit  variable jusqu'  ce qu'une valeur seuil sp cifique du rapport de densit  soit atteinte. Au-del  de cette limite, une augmentation de l'intermittence est observ e.



**Figure 3.14** : PDF( $\varphi$ ) des DNS de THI à densité variable moyennées sur l'intervalle d'étude  $\Gamma$  et comparées avec la condition initiale à densité constante (pointillés) : (a)  $\varphi = \partial u_x / \partial x$  ; (b)  $\varphi = \partial u_y / \partial x$  ; (c)  $\varphi = \omega_x$  ; (d)  $\varphi = \omega_y$  ; (f)  $\varphi = \partial \rho u_x / \partial x$  ; (e)  $\varphi = a_x$  (accélération lagrangienne). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.  $\langle Re_\lambda \rangle_\Gamma$  représente le nombre de Reynolds turbulent moyenné sur l'intervalle temporel  $\Gamma$ .



**Figure 3.15 :** PDF( $\varphi$ ) normalisées (par l'écart type  $\sigma(\varphi)$ ) des DNS de THI à densité variable moyennées sur l'intervalle d'étude  $\Gamma$  et comparées avec la condition initiale à densité constante (pointillés) : (a)  $\varphi = \partial u_x / \partial x$  ; (b)  $\varphi = \partial u_y / \partial x$  ; (c)  $\varphi = \omega_x$  ; (d)  $\varphi = \omega_y$  ; (e)  $\varphi = \partial \rho u_x / \partial x$ . (f)  $\varphi = a_x$  (accélération lagrangienne). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.  $\langle Re_\lambda \rangle_\Gamma$  représente le nombre de Reynolds turbulent moyenné sur l'intervalle temporel  $\Gamma$ .

### 3.4.2 Analyse des moments du champ de vitesse

Dans l'étude des PDF, il a été montré que, tout comme les écoulements turbulents à densité constante, la THI à densité variable présentent des PDF non gaussiennes et qui présentent des queues s'élargissant lorsque le rapport de densité augmente. Les statistiques non gaussiennes du champ de vitesse peuvent également être caractérisées quantitativement par les moments d'ordre trois et quatre de la dérivée longitudinale de la vitesse : le skewness  $S$  et le flatness  $F$ . La signification de ces coefficients est détaillée pour une distribution générale (autre que  $\partial u/\partial x$ ) dans la section précédente. Dans le cadre d'un écoulement isotrope, ils sont définis [79] par

$$S = \frac{\langle (\partial u_x/\partial x)^3 \rangle_\Omega}{\langle (\partial u_x/\partial x)^2 \rangle_\Omega^{3/2}}, \quad (3.15)$$

et

$$F = \frac{\langle (\partial u_x/\partial x)^4 \rangle_\Omega}{\langle (\partial u_x/\partial x)^2 \rangle_\Omega^2}. \quad (3.16)$$

Les travaux de KERR [49], VINCENT et MENEGUZZI [79] et JIMÉNEZ et al. [46], parmi tant d'autres, montrent que les PDF des champs de THI à densité constante sont légèrement étirées vers la droite, présentant donc un coefficient d'asymétrie négatif. La figure 3.14 indique que cette caractéristique est également présente dans les écoulements à densité variable, bien que les PDF semblent se symétriser pour des rapports de densité élevés. Pour les écoulements à densité constante, ISHIHARA et al. [41] ainsi que GYLFASON, AYYALASOMAYAJULA et WARHAFT [38], mesurent que le coefficient d'asymétrie  $S$  reste constant pour  $Re_\lambda < 200$ , et diminue lentement pour des  $Re_\lambda$  plus élevés. Les auteurs proposent la loi d'échelle suivante :

$$-S \approx (0.32 \mp 0.02) Re_\lambda^{0.11 \pm 0.01}. \quad (3.17)$$

Le tableau 3.1 présente les valeurs du skewness moyennées sur l'intervalle d'étude statistique  $\Gamma$  pour les différentes simulations à densité variable. Remarquablement, le skewness converge vers des valeurs différentes en fonction de  $s$ , même si le nombre de Reynolds turbulent reste inférieur à 200 pour tous les cas  $s > 1$ . Par exemple, pour  $s = 2$ , un coefficient d'asymétrie moyen de  $S = -0.43$  est obtenu, tandis que pour  $s = 4$ , il augmente jusqu'à  $S = -0.30$ . Ainsi, l'hypothèse d'un coefficient de skewness constant pour  $Re_\lambda < 200$  n'est plus valide pour les écoulements à densité variable. De plus, une augmentation de  $s$  tend également à augmenter le skewness. Cela suggère que les PDF deviennent progressivement plus symétriques à mesure que le rapport de densité augmente. Cette caractéristique est évidente dans la figure 3.15(a), où la PDF de  $\partial u_x/\partial x$  apparaît davantage symétrique pour  $s = 8$  que pour les autres valeurs de  $s$ . Enfin, la loi d'échelle fournie par l'équation (3.17) a tendance à surestimer la valeur absolue de  $S$  dans le cas des écoulements à densité variable. Il semble donc qu'une correction à cette loi semble nécessaire pour prendre en compte l'effet de  $s$ . Cependant, notre volume de données ne permet pas de mettre en place une loi d'échelle avec une précision suffisante.

Les investigations antérieures sur les écoulements à densité constante ont démontré que le flatness présente une tendance croissante lorsque le nombre de Reynolds augmente pour  $100 < Re_\lambda < 1000$ . ISHIHARA et al. [41] et proposent la loi d'échelle suivante

$$F \approx (1.14 \pm 0.19) Re_\lambda^{0.34 \pm 0.03}. \quad (3.18)$$

Bien que nos résultats coïncident avec une tendance croissante de  $F$  par rapport à  $Re_\lambda$ , la loi d'échelle mentionnée surestime le flatness lorsque les effets à densité variable entrent en jeu (voir tableau 3.1). Cependant, notre jeu de données n'est pas suffisamment vaste pour tirer des conclusions plus précises.

### 3.4.3 Conclusion sur l'analyse statistique

En synthèse, une analyse statistique de la dynamique turbulente à densité variable a été entreprise en calculant des moyennes des grandeurs caractéristiques sur l'intervalle  $\Gamma$ . Ce choix d'intervalle est basé sur le critère que le nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$ , et le coefficient d'asymétrie  $S$  n'y présentent que peu de fluctuations. Ainsi, il est possible de considérer que la turbulence est quasiment statistiquement stationnaire, ce qui justifie l'usage du processus de moyenne. Pendant cet intervalle, les effets de diffusion demeurent significatifs, ce qui assure la capture des interactions entre la THI et les variations de masse.

Dans une première phase d'analyse, il est observé que l'introduction d'un champ de densité inhomogène modifie le nombre de Reynolds turbulent, le rendant inversement proportionnel au rapport de densité  $s$ . Étant donné que ce nombre de Reynolds est un paramètre clé dans les lois d'échelles associées aux écoulements à densité constante, cette modification suggère un changement dans la dynamique turbulente. Plus particulièrement, dans les écoulements à densité constante, l'augmentation de  $Re_\lambda$  entraîne un élargissement des PDF du champ de vitesse.

Les tracés des PDF issus des simulations à densité variable révèlent que celles-ci présentent des queues plus évasées à mesure que  $s$  augmente, malgré le fait que  $Re_\lambda$  diminue en fonction de  $s$ . Cette observation souligne que les effets de densité induisent un processus de génération et de transfert d'énergie vers les structures à plus petite échelle, ce qui compense la diminution du nombre de Reynolds. Lorsque les PDF sont normalisées par l'écart type, l'écartement par rapport au cas à densité constante n'est plus aussi marqué, à l'exception de la simulation à  $s = 8$ . Il semble donc que l'introduction des effets de masse n'entraîne pas une augmentation significative de l'intermittence (mesure du chaos) jusqu'à atteindre une valeur seuil comprise entre  $4 < s \leq 8$ .

La littérature relative aux écoulements à densité constante [49, 41, 38] propose des lois d'échelle reliant les coefficients d'asymétrie (skewness) et d'aplatissement (flatness) au nombre de Reynolds turbulent. Ces coefficients jouent un rôle essentiel dans la quantification de l'intermittence turbulente en évaluant l'écart de distribution des données par rapport à un comportement gaussien. Ces lois d'échelle existantes ne capturent pas les modifications induites dans la dynamique par les effets de masse et nécessitent une révision. Cependant, le volume de données généré dans le cadre de cette étude ne permet pas d'effectuer ces ajustements. De plus, étant donné que le nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$  est fonction du rapport de densité  $s$ , une dépendance croisée entre ces deux paramètres complique l'élaboration d'une loi d'échelle de la forme

$$f \propto a Re_\lambda^\alpha s^\beta, \quad (3.19)$$

qui serait capable de rendre compte de la dynamique observée.

En perspectives de cette analyse, il serait bénéfique de raffiner le volume de données pour déterminer précisément la valeur seuil à partir de laquelle une augmentation nette de l'intermittence est observée sur les PDF normalisées. Un ensemble de données plus vaste permettrait également de développer une loi d'échelle  $Re_\lambda \propto s^\alpha$  pour le nombre de Reynolds turbulent en fonction du rapport de densité. De plus, cela permettrait de tenter d'établir une loi d'échelle pour le skewness et le flatness comme abordé dans le paragraphe précédent. Enfin, il serait pertinent de prolonger les simulations jusqu'à atteindre un mélange complet et d'étudier les statistiques pour comparer l'état final à l'état initial. Cette comparaison permettrait de vérifier si une trace de l'introduction du champ de densité inhomogène persiste après le mélange.

L'altération de la dynamique aux petites échelles observée, caractérisée par l'écartement des ailes des PDF et les fluctuations du skewness et flatness, est l'objet d'une analyse plus approfondie dans la section suivante consacrée à l'analyse spectrale.



### 3.5 Analyse spectrale

L'analyse statistique illustre une modification des distributions d'énergie sur les différentes échelles à mesure que les effets à densité variable augmentent. Dans le but d'expliquer ce comportement, cette section est consacrée à fournir des perspectives physiques sur la structure de l'écoulement en utilisant l'analyse spectrale de Fourier et la visualisation des champs de l'écoulement.

Avant de recourir aux outils spectraux, il est judicieux de procéder à la visualisation de l'écoulement afin de déterminer si les phénomènes mis en évidence par l'analyse ont un impact perceptible sur les champs de l'écoulement.

#### 3.5.1 Visualisation du champ de vortacité

La figure 3.16 illustre, dans les panneaux (c) et (d), les isosurfaces de la norme de vortacité  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$  de la simulation 256-4 au temps  $t = 4$  (début de l'intervalle d'étude  $I$ ). Les isosurfaces de la condition initiale à densité constante (issue de la simulation 256-1) sont représentées dans les panneaux (a) et (b) pour comparaison. Dans les panneaux (b) et (c), les données sont filtrées et seules les isosurfaces les plus intenses (deux écarts types au-dessus de la moyenne) sont représentées. La visualisation de la vortacité permet de mettre en évidence les structures tourbillonnaires de l'écoulement. Il est remarquable que l'écoulement à densité variable présente des structures cohérentes de taille plus réduite que celles observées dans l'écoulement à densité constante. De plus, des valeurs de vortacité plus élevées sont observées dans l'écoulement à densité variable, ce qui confirme l'observation de gradients de vitesse plus prononcés associés aux plus petites structures.

De manière similaire, la figure 3.17 illustre les isosurfaces de vortacité résultant des simulations 256-0.5 et 256-8 (à  $t = 4$ ). Sur cette figure, il est possible de discerner que l'écoulement à  $s = 8$  manifeste des structures de taille encore plus réduite (ainsi que des valeurs de vortacité plus élevées) que celles observées dans l'écoulement à  $s = 4$ . Cette dissemblance entre les deux écoulements est en corrélation avec l'écartement observé dans les PDF. Il semble donc que la taille des structures tourbillonnaires les plus petites varie de fonction inverse à  $s$ . D'un autre côté, l'écoulement à  $s = 0.5$  exhibe des structures de taille comparable à celles engendrées par l'écoulement à densité constante. Cette nouvelle constatation confirme l'observation antérieure selon laquelle, pour des valeurs de  $s$  inférieures à 1, la dynamique turbulente est peu impactée.

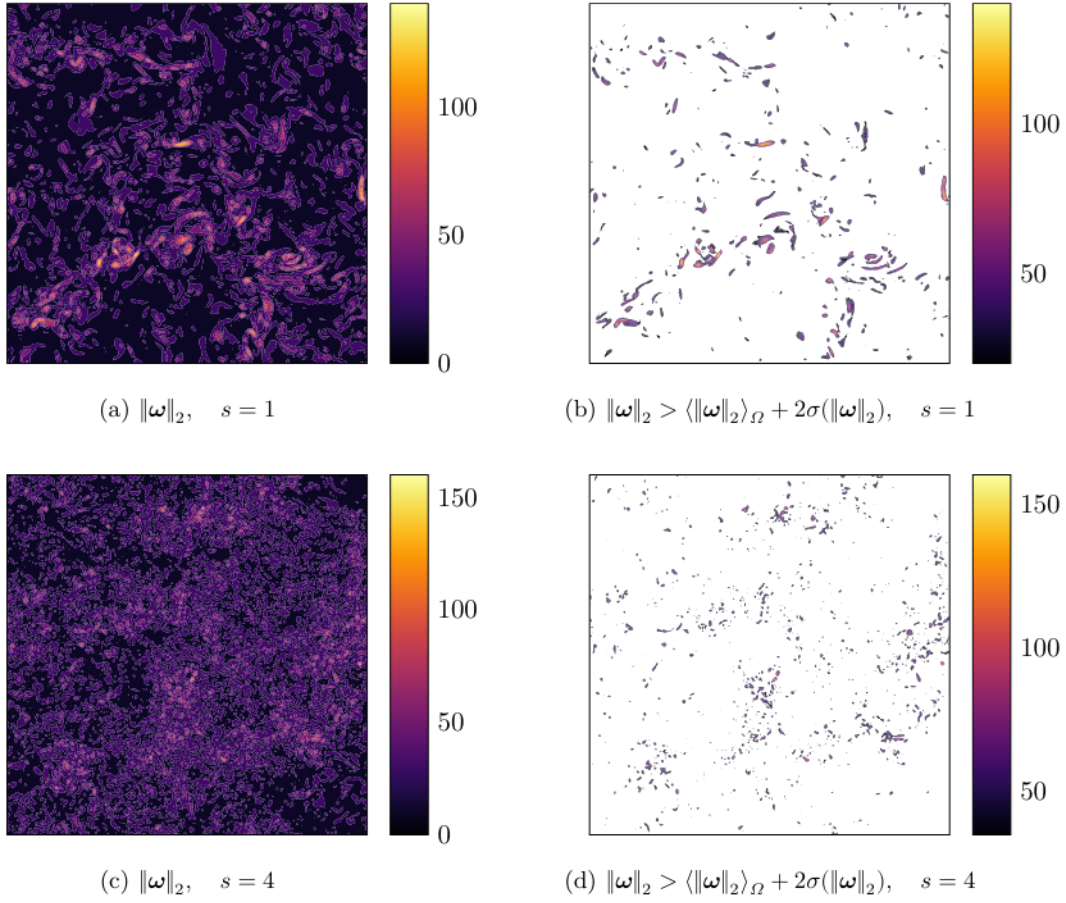
Des visualisations supplémentaires de champs de vortacité provenant des diverses simulations réalisées sont exposées dans l'annexe C.2.

#### 3.5.2 Spectres d'énergie

Les méthodes spectrales offrent des moyens d'accéder aux caractéristiques des différentes tailles de structures tourbillonnaires en examinant les modes de Fourier associés. Parmi ces outils, le spectre d'énergie, discuté dans la section 1.3.2, permet de quantifier le niveau d'énergie associé à chaque taille de tourbillons. La théorie de KOLMOGOROV [50] postule que, dans les écoulements à densité constante, le spectre d'énergie suit une loi en  $k^{-5/3}$  dans la zone inertielle.

Les résultats obtenus à partir de l'analyse statistique suggèrent l'existence de dynamiques à petites échelles induites par l'introduction d'effets de masse dans l'écoulement turbulent. Si cette modification se manifeste dans le spectre, on s'attend à la détecter dans les plus petites échelles de la zone inertielle, juste avant la coupure visqueuse. Cependant, les variations de comportement observées dans les PDF et les moments du champ de vitesse ne sont pas significatives, laissant supposer que la forme du spectre aux grandes échelles et aux échelles intermédiaires reste similaire à celle observée dans les écoulements à densité constante.

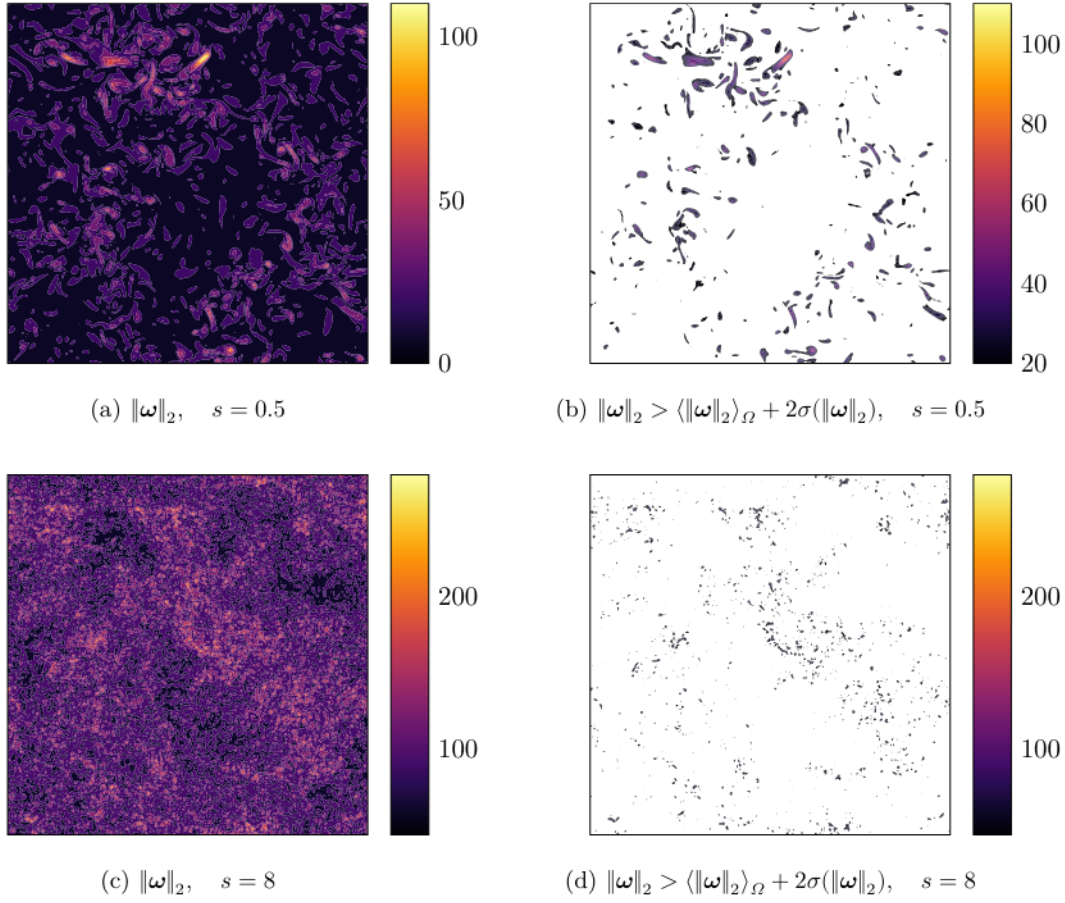
La figure 3.18 présente les spectres d'énergie moyennés sur l'intervalle d'étude  $I$ . Le spectre de la condition initiale à densité constante est inclus à titre de comparaison. Dans les panneaux supérieurs, où les spectres à densité variable de l'énergie cinétique par unité de masse  $\frac{1}{2}\mathbf{u}^2$  sont comparés au spectre à densité constante, une forme différente est observée à la fin de la zone inertielle pour  $k > 20$ . Cette modification est nettement plus visible dans le panneau de droite, où la plage spectrale est limitée à



**Figure 3.16** : Tracé des isosurfaces de la norme de la vorticité  $\|\omega\|_2$  dans la section transversale  $xz$  pour : (a) et (b) la condition initiale à densité constante 256-1; (c) et (d) la DNS de THI à densité variable 256-4 (au temps  $t = 4$ ). (b) et (d) représentent les isosurfaces les plus intenses (deux écarts types au-dessus de la moyenne).

$k \in [10, 140]$ , représentant la zone inertielle. Comme illustré sur les panneaux centraux, les spectres à densité variable s'écarte de la loi de KOLMOGOROV  $E(k) \sim k^{-5/3}$  (représentée en pointillés) à partir de  $k > 20$  et présente une décroissance plus marquée. En revanche, les spectres à densité variable ne présentent pas la même décroissance, à l'exception de  $s < 1$ . Au contraire, les cas avec  $s \geq 4$  présentent une augmentation de la pente jusqu'à la coupure visqueuse. Cette observation relève un phénomène modifiant les niveaux d'énergie cinétique dans les dernières gammes de structures de la zone inertielle. Ce phénomène est également capturé par les spectres  $E_\rho(k)$  d'énergie cinétique par unité de volume  $\frac{1}{2}\rho\mathbf{u}^2$ , présentés en pointillés dans les panneaux inférieurs.

En résumé, les spectres des simulations à densité variable présentent un pic d'énergie dans les dernières échelles de la zone inertielle qui est absent des spectres à densité constante. Cette modification confirme l'existence d'une dynamique supplémentaire introduite par les effets de masse, qui devient dominante au-delà d'une certaine taille de structure. Cette observation complète l'analyse des PDF du champ de vitesse. Ces dernières mettent en évidence une plus grande répartition des structures énergétiques dans l'écoulement à densité variable que dans l'écoulement à densité constante. L'analyse des spectres indique que cette augmentation de la répartition de l'énergie est associée à un gain de niveau d'énergie au sein des structures les plus petites de l'écoulement. Il semble donc que dans un écoulement de THI à densité variable, les échelles finales de la zone inertielle, qui dans le cas à densité constante sont liées au processus de diffusion visqueuse, présentent une dynamique de transfert d'énergie



**Figure 3.17** : Tracé des isosurfaces de la norme de la vorticité  $\|\omega\|_2$  dans la section transversale  $xz$  de simulations de THI à densité variable (au temps  $t = 4$ ) : (a) et (b) 256-0.25 (c) et (d) 256-8. (b) et (d) représentent les isosurfaces les plus intenses (deux écarts types au-dessus de la moyenne).

induite par les effets de diffusion de masse.

Ainsi, la dissipation visqueuse émerge comme le processus prédominant à des échelles plus petites que dans le cas à densité constante. Ce résultat est également illustré par la réduction de l'échelle de Taylor et de Kolmogorov en fonction du rapport de densité  $s$ . Ceci est observable dans le tableau 3.1 et dans la figure 3.19, où les spectres sont accompagnés de lignes verticales délimitant les modes associés aux échelles de Taylor. Notamment, sur cette figure, la ligne verticale représentant l'échelle de Taylor de la simulation à densité variable s'éloigne progressivement de celle à densité constante à mesure que  $s$  augmente. Pour  $s < 1$ , l'échelle de Taylor augmente et la coupure visqueuse apparaît plus tôt sur le spectre. Dans les DNS de THI à densité constante, la réduction des échelles et le report de la coupure visqueuse vers des échelles plus petites sont des conséquences de l'augmentation du nombre de Reynolds. Par conséquent, l'augmentation de  $s$  entraîne un phénomène similaire à une augmentation du nombre de Reynolds  $Re$ . Cette observation est en accord avec les résultats de l'étude des PDF, où l'augmentation de  $s$  conduit à un élargissement, ce qui est généralement associé à une augmentation de  $Re$ .

Ce comportement peut être déduit de l'équation de quantité de mouvement équation (1.27a), où le terme de dissipation visqueuse se transforme, lors de l'introduction du champ de densité variable, de  $Re^{-1} \nabla^2 \mathbf{u}$  à

$$(\rho Re)^{-1} \nabla^2 \mathbf{u} \approx \left( \frac{s-1}{2} Re \right)^{-1} \nabla^2 \mathbf{u} \equiv Re'^{-1} \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.20)$$

où  $\frac{1}{2}(s-1)$  représente la valeur moyenne du champ de densité. Ainsi, pour  $s > 1$ , l'introduction du

champ à densité variable conduit à une augmentation du nombre de Reynolds équivalent  $Re'$  et, par conséquent, à une diminution de l'échelle de longueur visqueuse. En revanche, pour  $s < 1$ ,  $Re'$  diminue, entraînant une augmentation de l'échelle de longueur visqueuse. Cette augmentation de l'échelle de longueur visqueuse explique le comportement observé dans les simulations à  $s < 1$ . Il convient de rappeler qu'il a été observé que l'introduction d'un champ de densité où le fluide le plus léger est confiné à l'intérieur de la sphère de la condition initiale a peu d'influence sur la dynamique turbulente. Cela se traduit par des PDF du champ de vitesse moins écartées que celles de la simulation à densité constante, ainsi que des spectres présentant une coupure visqueuse à des échelles plus grandes. En conséquence, dans cette configuration, la coupure visqueuse se produit avant la gamme d'échelles où les effets à densité variable introduisent le pic d'énergie. Cela entraîne donc un impact limité sur la dynamique turbulente. Il est donc important de noter que l'écoulement ne présente pas de symétrie  $s \rightarrow s^{-1}$ , puisque les valeurs moyennes de  $\rho$  ne sont pas égales, ce qui entraîne des nombres de Reynolds équivalents différents et, par conséquent, des dynamiques différentes.

En résumé, l'analyse des spectres confirme la modification de la dynamique turbulente observée lors de l'étude des PDF. En effet, pour  $s > 1$ , une augmentation du niveau d'énergie est perceptible dans les dernières échelles de la gamme inertielle, retardant ainsi la coupure visqueuse et en entraînant la génération de structures plus petites au sein de l'écoulement.

### 3.5.3 Spectres d'instabilité RTI

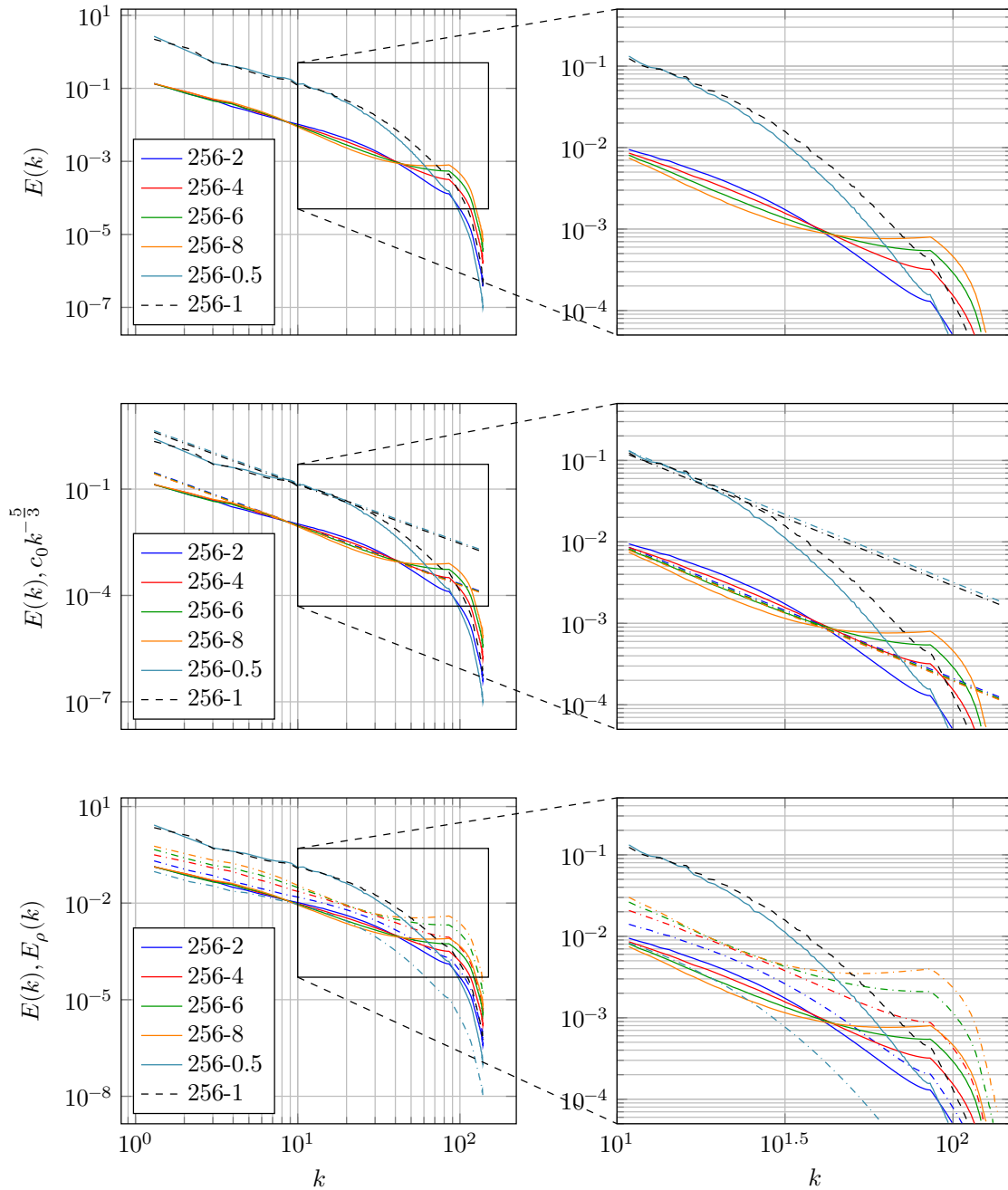
Il est largement admis que les variations de densité peuvent engendrer divers phénomènes, parmi lesquels la Rayleigh–Taylor Instability (RTI, *Instabilité de Rayleigh–Taylor*) occupe une place prééminente [72, 23, 43, 83]. Cette instabilité fondamentale se produit à l'interface entre deux fluides de densités différentes lorsque le fluide le plus dense est accéléré dans le fluide moins dense. Ce phénomène est connu pour initier des mouvements turbulents et donner lieu à la formation de structures complexes. Dans la THI à densité variable, le mélange du champ inhomogène de densité peut conduire à la formation de configurations de RTI à différentes échelles. En effet, des paquets de particules fluides de différentes densités se retrouvent superposés dans un écoulement chaotique présentant de fortes fluctuations. Ainsi, ce régime d'écoulement semble être propice au développement d'une dynamique pilotée par de la RTI. L'émergence de structures à haute énergie au sein de la partie inférieure du spectre pourrait ainsi découler du développement de structures tourbillonnaires piloté par une dynamique de type RTI.

Les travaux de JACQUES [42, chapitre 4] mettent en évidence que

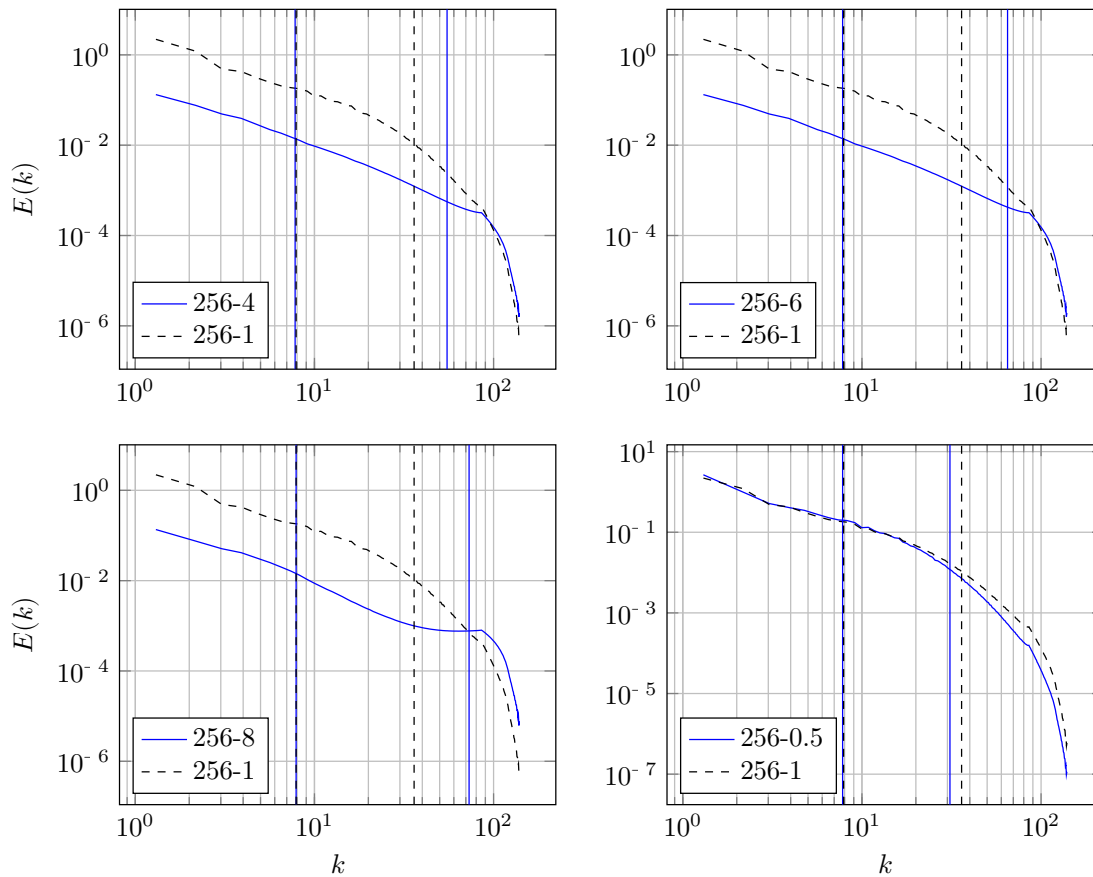
$$-G^2 = \text{accélération locale} \cdot \text{variation de densité locale} = (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} \cdot \nabla\rho/\rho < 0 \quad (3.21)$$

représente un critère suffisant pour le déclenchement de RTI dans les régions instables en rotation d'un jet plan à densité variable. Ce résultat est obtenu en généralisant le taux de croissance  $\sqrt{-\mathbf{a}_c(r) \cdot \nabla\rho/\rho}$  obtenu pour une instabilité cylindrique de Rayleigh–Taylor au cas du jet. Dans cette configuration simplifiée, l'instabilité se déclenche lorsque l'accélération centrifuge locale  $\mathbf{a}_c(r) = \Omega^2 r$  et le gradient de densité réduit  $\nabla\rho/\rho$  sont de directions opposées. La généralisation au cas des structures tourbillonnaires du jet est accomplie en substituant l'accélération centrifuge par l'accélération convective locale  $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ . Compte tenu des configurations de RTI en rotation présentes dans THI à densité variable, ce critère peut être employé afin d'identifier l'émergence de ces instabilités au sein des simulations. La figure 3.20 présente une coupe transversale issue de DNS 256-4 du critère  $G^2$  de la RTI. La coupe du champ de vorticit  est  galement illustr e pour comparaison. Une fois de plus, le champ complet ainsi que les champs filtr s, qui ne r v lent que les structures les plus intenses, sont repr sent s. Lorsqu'on compare le crit re  $G^2$    la vorticit , il appara t que les deux grandeurs exhibent des structures analogues. Cette similitude renforce l'hypoth se d'une dynamique de type RTI jouant un r le pr pond rant dans la g n ration des structures de plus petite  chelle. Cependant, il n'est pas pertinent d' tudier la corr lation spatiale ou spectrale entre  $G^2$  et  $\omega$ ,  tant donn  que  $G^2$  comprend un terme en  $\nabla\mathbf{u}$  qui est tr s semblable   la vorticit . Par cons quent, il serait difficile d'obtenir une information physique significative   partir de cette corr lation.

D'un autre c t , du fait que ces ph nom nes peuvent se produire   diverses  chelles, une d composition spectrale permet de repr senter ce crit re pour chaque dimension de structure tourbillonnaire.



**Figure 3.18** : Spectres d'énergie des DNS de THI à densité variable moyennés sur l'intervalle d'étude  $\Gamma$  : (haut) spectres  $E(k)$  ; (milieu) spectres  $E(k)$  comparés à la loi de Kolmogorov (pointillés)  $E \sim k^{-\frac{5}{3}}$  ; (bas) spectres  $E(k)$  (énergie cinétique par unité de masse) et  $E_\rho(k)$  (énergie cinétique par unité de volume, pointillés). Dans les panneaux de droite, le domaine est restreint à la zone inertielle ( $k \in [10, 140]$ ). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



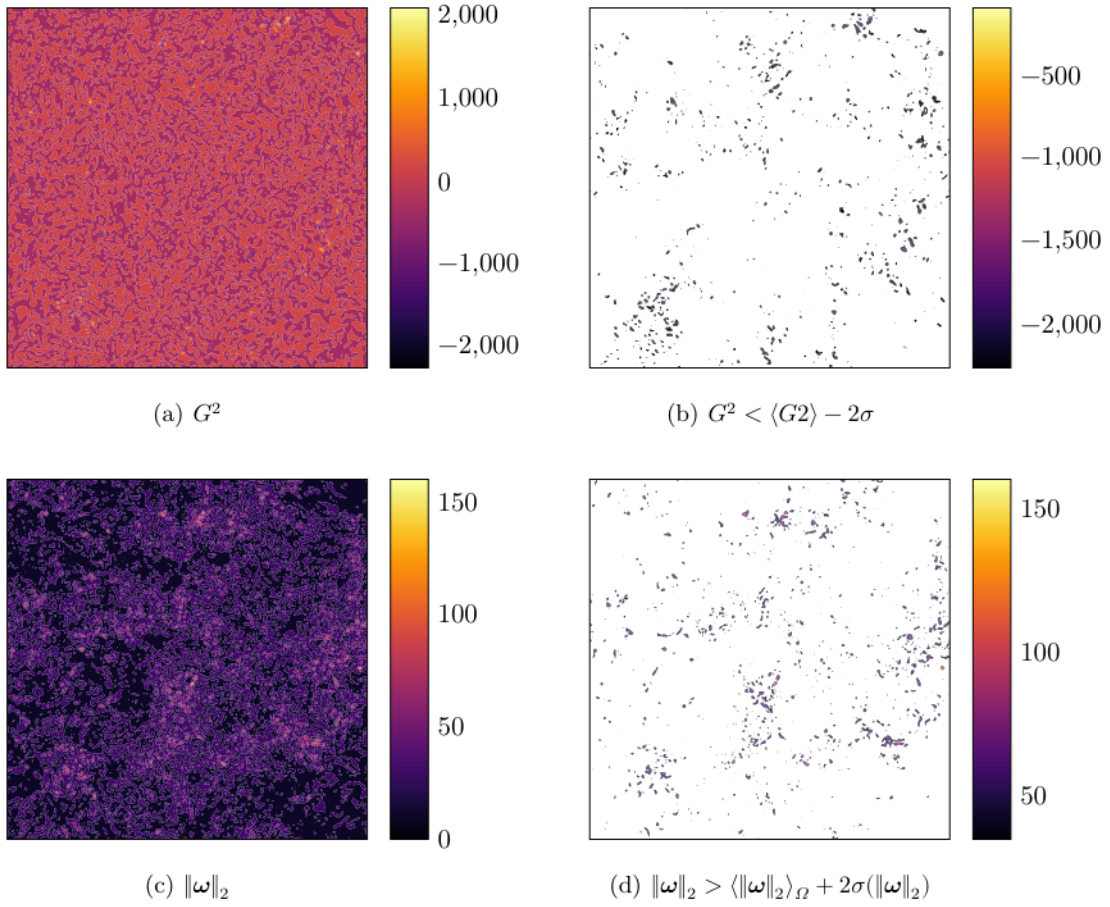
**Figure 3.19** : Spectres d'énergie des DNS de THI à densité variable moyennés sur l'intervalle d'étude  $\Gamma$  et comparés au spectre de la simulation à densité constante 256-1 (pointillés). Les lignes verticales représentent les échelles intégrales et de Taylor associées, définies dans les équations équation (1.44a) et équation (1.44b) page 18. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

La figure 3.21 illustre, pour chaque simulation, une comparaison entre la densité spectrale d'énergie du critère RTI

$$\text{DSE}(G^2) = |\mathcal{F}G^2|^2 \quad (3.22)$$

et le spectre d'énergie de la turbulence correspondant. Il est important de noter que la région où le critère présente la plus grande énergie coïncide avec la plage de modes où les variations d'énergie sur le spectre sont observées. Ce résultat supporte l'idée que les variations de niveaux d'énergie par rapport au cas à densité constante, observées dans la partie inférieure du spectre, sont étroitement liées à une interaction entre la turbulence et une dynamique de type RTI.





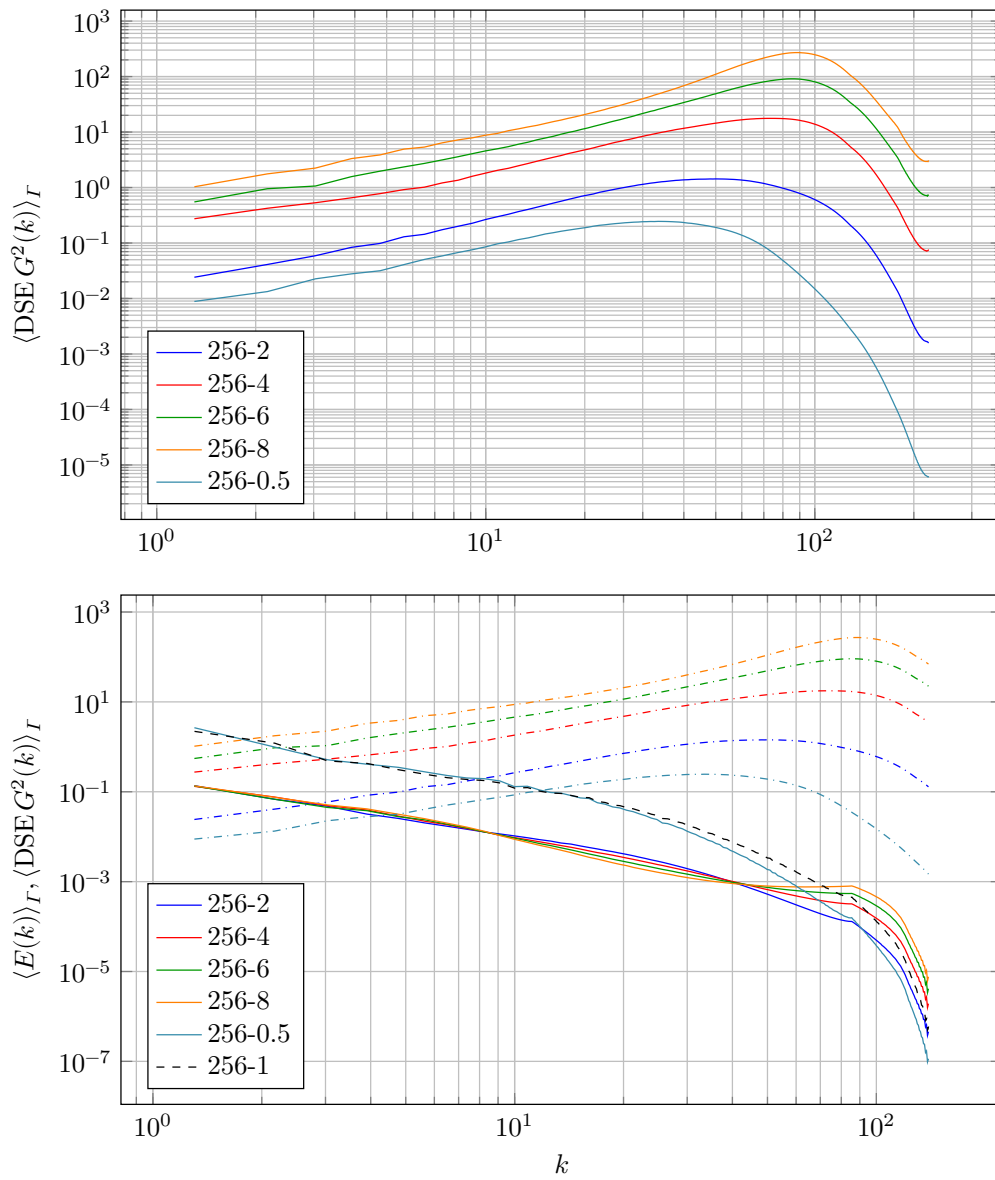
**Figure 3.20** : Tracé des isosurfaces dans la section transversale  $xz$  de la DNS de THI 256-4 (au temps  $t = 4$ ) : (a) et (b) du critère de RTI ; (c) et (d) de la norme de la vorticité. (b) et (d) représentent les isosurfaces les plus intenses (deux écarts types au-dessus de la moyenne).

### 3.5.4 Modèle de prédiction de modification du spectre

La visualisation de la densité spectrale d'énergie du critère d'émergence de RTI confirme la présence d'une dynamique de type RTI dans la région où des variations de niveaux d'énergie sont observées sur le spectre d'énergie. Afin de rendre compte de cette modification de comportement, il est envisageable d'établir un modèle de prédiction basé sur la théorie de l'instabilité RTI développée par JACQUES [42] et la théorie du spectre d'énergie de KOLMOGOROV [50]. Notamment, en supposant que les effets de la dynamique RTI deviennent significatifs à partir d'une certaine taille d'échelle, il devient envisageable d'appliquer une correction additive au spectre de Kolmogorov de la forme

$$E(k) = E_{\text{KOLMO}}(k) + E_{\text{RTI}}(k) \quad (3.23)$$

pour modéliser le spectre obtenu dans les DNS de THI à densité variable. Ici, la correction à densité variable  $E_{\text{RTI}}(k)$  est négligeable devant la loi de Kolmogorov jusqu'à un certain mode, associé à l'échelle où les variations de comportement sont observées. Il est important de noter que cette approche additive demeure approximative dans la mesure où elle suggère que la dynamique décrite par KOLMOGOROV et celle pilotée par la RTI sont indépendantes, ou du moins suffisamment indépendantes pour être découplées sous cette forme.



**Figure 3.21** : Densités spectrales d'énergie du critère de RTI des DNS de THI à densité variable (haut) comparées aux spectres d'énergie (bas).



Comme exposé en détail dans la sous-section précédente, dans la configuration de l'étude, le processus de formation de l'instabilité de RTI est piloté par le critère

$$-G^2 = (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cdot \nabla \rho / \rho < 0. \quad (3.24)$$

Cette relation met en évidence la taille caractéristique initiale  $\delta$  des gradients de densité

$$\left\| \frac{1}{\rho} \nabla \rho \right\|_{t=0} = \frac{1}{\delta} = \frac{k_\delta}{2\pi} \quad (3.25)$$

associée au mode de Fourier  $k_\delta$ . La question qui se pose est de savoir si cette échelle peut être considérée comme valable à des instants autres que l'instant initial. Étant donné que l'équation de densité suit une équation de convection-diffusion, si le temps caractéristique de convection est inférieur au temps caractéristique de diffusion, il est raisonnable de supposer que  $\delta$  reste constant au cours du temps. Les simulations étant paramétrées avec un nombre de Reynolds de 1000 et un nombre de Schmidt de 1, le rapport entre les effets de convection et de diffusion de masse est caractérisé par un nombre de Péclet

$$Pe = Re Sc = 1000. \quad (3.26)$$

Bien que ce rapport soit représentatif de la dynamique globale de l'écoulement et non spécifiquement du champ de densité, il est raisonnable de présumer que l'échelle de temps de convection est très inférieure à l'échelle de temps de diffusion. Par conséquent, l'échelle de densité  $\delta$  peut être traitée comme constante au cours du temps.

D'après le développement de JACQUES [42], le taux de croissance de la RTI peut être représenté par

$$\varsigma = \sqrt{-G^2} = \sqrt{(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cdot \nabla \rho / \rho}. \quad (3.27)$$

En considérant le taux de transfert d'énergie  $\varepsilon$  associé à la RTI, dont la dimension est

$$[\varepsilon] = [L^2 T^{-3}], \quad (3.28)$$

il est possible de construire une échelle temporelle associée, représentant le temps de vie des instabilités. En supposant que le taux de transfert d'énergie soit constant pour toutes les échelles de l'écoulement, et en considérant  $\delta$  comme l'échelle de longueur caractéristique de l'instabilité (d'après les équations (3.25) et (3.27)), cette échelle de temps s'exprime par

$$T_{\text{RTI}} = \left( \frac{\varepsilon}{\delta^2} \right)^{-\frac{1}{3}}. \quad (3.29)$$

La construction de cette échelle temporelle suit une approche similaire à celle de KOLMOGOROV, à la différence que dans ce cas, l'échelle spatiale,  $\delta$ , est déjà connue. Ce temps caractéristique permet notamment de déterminer un taux de croissance qui, à son tour, permet de calculer une vitesse caractéristique. Cette vitesse sera utilisée pour modéliser le spectre d'énergie. Par une analyse dimensionnelle, le taux de croissance peut être exprimé dans l'espace spectral comme une fonction autosimilaire

$$\hat{\zeta}(k) = T_{\text{RTI}}^{-1} (k\delta)^n = \frac{\varepsilon^{\frac{1}{3}}}{\delta^{-\frac{2}{3}}} (k\delta)^n. \quad (3.30)$$

En comparant cette équation avec celle de  $\varsigma$  dans l'espace physique (3.27), il est remarquable que l'échelle du tourbillon  $1/k$  a le même poids que l'échelle des gradients  $\delta$ . Pour assurer cette même pondération dans l'équation (3.30),  $n = 1/3$  est la seule solution et conduit à

$$\hat{\zeta}(k) = \varepsilon^{\frac{1}{3}} k^{\frac{1}{3}} \delta^{-\frac{1}{3}}. \quad (3.31)$$

En fin de compte, une vitesse caractéristique de la dynamique RTI peut être construite à partir de ce taux de croissance :

$$\hat{u}_{\text{RTI}}(k) = \frac{\hat{\zeta}(k)}{k} \sim k^{-\frac{2}{3}} \quad (3.32)$$

En utilisant le critère d'instabilité RTI défini par l'équation (3.24) et tenant compte de l'hypothèse précédemment énoncée, selon laquelle l'échelle caractéristique des gradients de densité  $\delta$  reste constante tout au long de la simulation, deux comportements distincts peuvent être observés en fonction de la taille des tourbillons (voir figure 3.22) :

- Lorsque le tourbillon est plus grand que l'échelle des gradients de densité ( $k < k_\delta$ ), sa stabilité vis-à-vis de la RTI dépend de son alignement avec  $\nabla\rho$  comme énoncé par le critère.
- En revanche, si le tourbillon est plus petit que l'échelle des gradients de densité ( $k > k_\delta$ ), il est inévitablement instable quelque soit sa taille, et la RTI domine son comportement.

Ces deux dynamiques distinctes créent une rupture dans la cascade du spectre située au mode associé à l'échelle des gradients de densité  $\delta$ , noté  $k_\delta$ . Dans les premières échelles de la zone inertielle, le comportement décrit par KOLMOGOROV en  $E(k) \sim k^{-5/3}$  est observé :

$$E(k \ll k_\delta) \sim E_{\text{KOLMO}}(k) \sim c_0 \frac{u_{\text{KOLMO}}(k)^2}{k} \sim c_0 k^{-5/3} \quad (3.33)$$

Dans les échelles intermédiaires de la gamme inertielle, et ce, jusqu'au mode critique  $k_\delta$ , l'instabilité conditionnelle des tourbillons pompe de l'énergie à la dynamique turbulente et le spectre doit être corrigé par une correction de couplage entre les effets turbulents et la RTI :

$$E(k < k_\delta) \sim c_1 \frac{u_{\text{KOLMO}}(k)u_{\text{RTI}}(k)}{k}, \quad (3.34a)$$

$$\sim c_1 \frac{k^{-1/3} k^{-2/3}}{k}, \quad (3.34b)$$

$$\sim c_1 k^{-2}. \quad (3.34c)$$

Au-delà de ce mode critique, tous les tourbillons sont instables, quelle que soit leur taille et la correction additive au spectre

$$E_{\text{RTI}}(k > k_\delta) \sim c_2 \hat{\epsilon}(k)^2 \delta^3 \quad (3.35)$$

s'obtient par analyse dimensionnelle. Ainsi, la dynamique du spectre aux plus petites échelles est donnée par

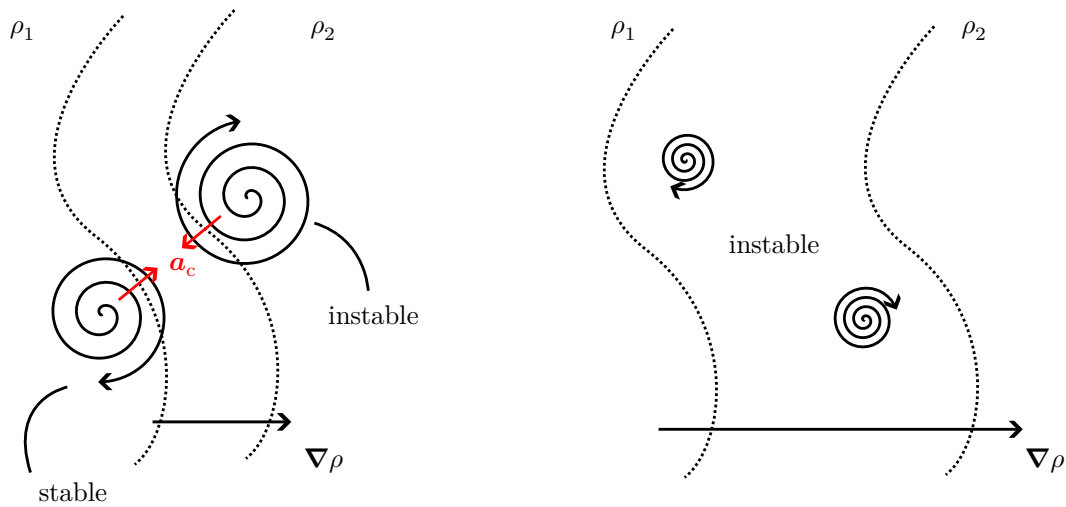
$$E(k > k_\delta) \sim E_{\text{KOLMO}}(k) + E_{\text{RTI}}(k > k_\delta) \sim c_0 k^{-5/3} + c_2 \delta^{1/3} k^{2/3}. \quad (3.36)$$

Finalement, le spectre de la turbulence à densité variable peut être modélisé par

$$E(k) \sim \begin{cases} c_0 k^{-5/3} & k \ll k_\delta \\ c_1 k^{-2} & k < k_\delta \\ c_0 k^{-5/3} + c_2 \delta^{1/3} k^{2/3} & k > k_\delta \end{cases} \quad (3.37)$$

La figure 3.23 présente une superposition de ce modèle avec les spectre de THI à densité variable des simulations 256-6 et 256-8. Dans les panneaux de gauche, le comportement en  $k^{-2}$  est représenté en pointillés. Il est à noter que ce comportement est tangent la pente du spectre dans les échelles intermédiaires de la zone inertielle. Dans le panneau de droite, le comportement en  $k^{2/3}$  est superposé à la différence  $E(s) - E(s=1)$  entre le spectre de la simulation à densité variable et celui de la simulation à densité constante 256-1. Ici aussi, la tendance en  $k^{2/3}$  correspond à la différence de spectres observée dans les plus petites échelles de la simulation.

Il est essentiel de souligner que ce modèle offre une explication quantitative de la modification du spectre d'énergie dans le cas à densité variable grâce à l'introduction d'un spectre caractéristique de la RTI. Il suggère une correction additive à la loi de Kolmogorov, mais les paramètres de cette correction ne sont pas précisément déterminés.



**Figure 3.22 :** Illustration de la stabilité RTI des tourbillons en fonction de leur taille : (gauche) les tourbillons sont plus grands que la taille caractéristique du gradient de densité  $\delta$  ; (droite) les tourbillons sont plus petits que  $\delta$ . La stabilité RTI est définie via le critère décrit par l'équation (3.24) page 80 et  $\delta$  est définie par l'équation (3.25) page 80.  $\mathbf{a}_c$  représente l'accélération centrifuge.

### 3.6 Conclusions

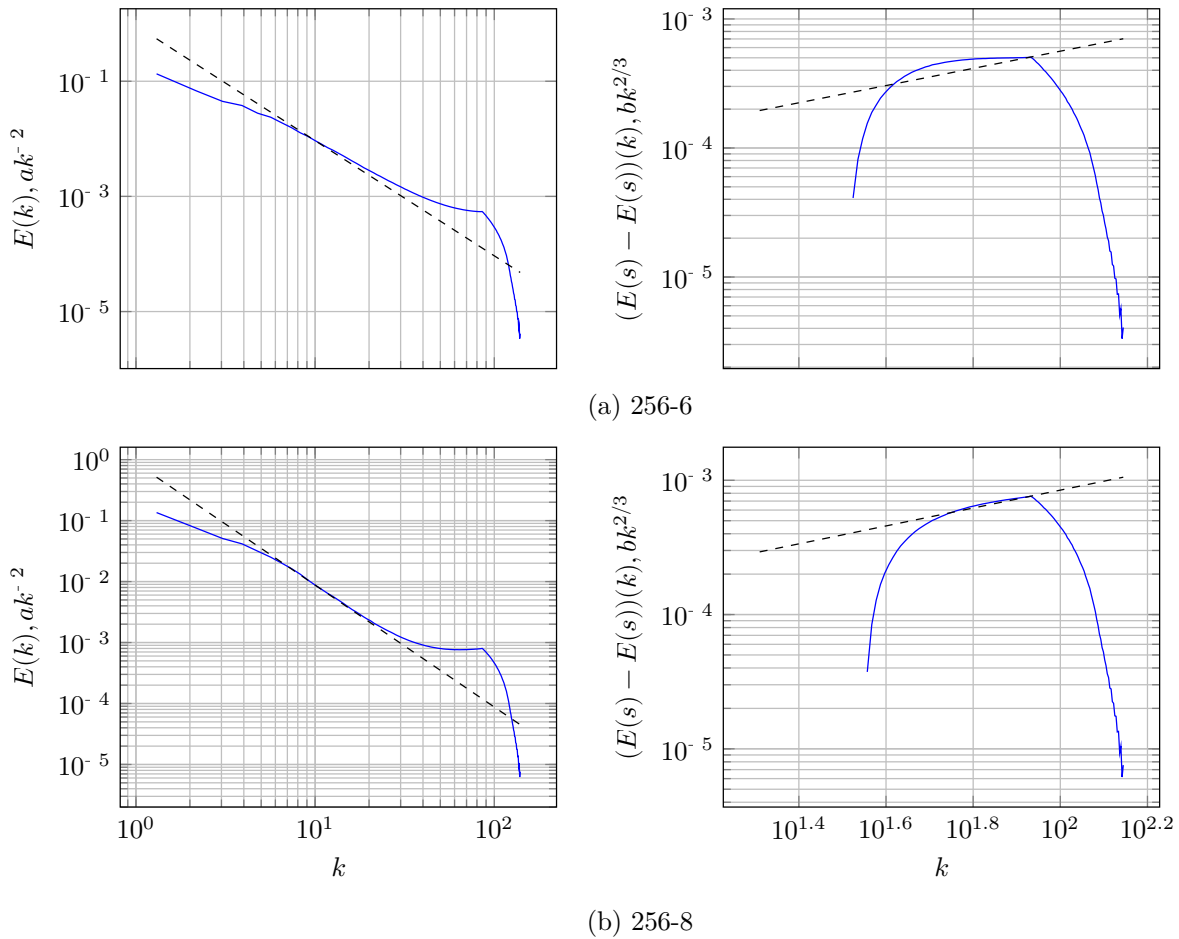
Pour conclure l'étude de la THI à densité variable, cette section résume les travaux réalisés et les résultats obtenus, tout en proposant des perspectives de poursuite de cette étude.

Des DNS de THI ont été réalisées en forçant les équations de la dynamique à densité variable en introduisant un terme de forçage. La méthode de forçage utilisée est une extension de la méthode de LUNDGREN [55] adaptée à ces équations avec diffusion de masse. Elle introduit un terme linéaire  $qu$  dans l'équation de quantité de mouvement, assurant ainsi la conservation de l'énergie cinétique malgré la dissipation visqueuse. Afin d'étudier les effets d'un champ de densité inhomogène sur une turbulence isotrope, un champ de densité est introduit dans une condition initiale turbulente obtenue à partir d'une DNS de THI à densité constante. Le champ de densité initial est composé de deux phases de fluide pur : la plus dense est confinée à l'intérieur d'une sphère, tandis que la moins dense l'entoure. L'introduction du champ de densité dans les champs turbulents entraîne son mélange progressif, catalysé par les tourbillons présents au sein de l'écoulement.

#### 3.6.1 Résumé des résultats

Une première analyse temporelle révèle que l'introduction du champ de densité dans l'écoulement turbulent a un impact sur son nombre de Reynolds turbulent, basé sur l'échelle de Taylor. Cette observation initiale suggère une modification de la dynamique aux petites en raison des effets de masse. L'examen des contributions au forçage, des termes de l'équation d'énergie cinétique, montre que le terme de diffusion visqueuse  $\nabla^2 \mathbf{u}$  est prédominant, ce qui suggère que les termes de couplage densité-vitesse aient une dynamique de transport plutôt que de diffusion.

Une analyse statistique est ensuite effectuée en moyennant les champs sur une période d'environ deux temps de retournement, au cours de laquelle la turbulence est statistiquement stationnaire et où les effets de diffusion demeurent significatifs. Cette analyse permet d'examiner les PDF du champ de vitesse ainsi que ses moments. L'étude montre que les effets de masse provoquent un élargissement des PDF proportionnel au rapport de densité  $s$ . Cet élargissement est une conséquence généralement attribuée à l'augmentation du nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$  dans les cas à densité constante. Cependant,  $Re_\lambda$



**Figure 3.23** : Illustration du modèle de prédiction du spectre d'énergie de THI à densité variable défini par équation (3.37). Le comportement en  $k^{-2}$  dans la zone inertielle est tracé en pointillé dans le panneau de gauche, en comparaison du spectre d'énergie. Le comportement en  $k^{2/3}$  aux petites échelles est tracé en pointillés dans panneau de droite en comparaison de la différence entre le spectre à densité variable et le spectre à densité constante de la condition initiale (256-1). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

est mesuré comme décroissant en fonction de  $s$ . Ainsi, l'introduction du champ de densité inhomogène a un effet similaire à l'augmentation du nombre de Reynolds : il engendre la génération de structures à des échelles plus petites. Le calcul des moments du champ de vitesse révèle que les lois d'échelles  $-S = a Re_\lambda^\alpha$  et  $F = b Re_\lambda^\beta$  de la littérature à densité constante nécessitent des ajustements pour prendre en compte les effets à densité variable.

La visualisation de l'écoulement à travers les isosurfaces du champ de vorticit   confirme la formation de structures plus petites dans les   coulements    densit   variable. Une analyse spectrale est ensuite effectu  e pour examiner le comportement   nerg  tique des diff  rentes tailles de structures par le biais d'une d  composition de Fourier. L'  tude du spectre d'  nergie turbulent r  v  le que la cascade turbulente de KOLMOGOROV  $E \sim k^{-5/3}$  est conserv  e dans la zone inertielle. De plus, cette zone inertielle s'  tend proportionnellement au rapport de densit    $s$ . En d'autres termes, plus  $s$  est   lev  , plus la coupure visqueuse se produit tardivement dans le spectre d'  nergie. Mais encore, en fin de zone inertielle, une   l  vation significative du niveau d'  nergie se manifeste et cette   l  vation est d'autant plus marqu  e lorsque le param  tre  $s$  augmente. Ce comportement est   galement observ   dans les spectres  $E_\rho(k)$  d'  nergie cin  tique par unit   de volume  $\frac{1}{2}\rho u^2$ .

Ce changement de pente observ   dans le spectre t  moigne de la pr  sence d'une dynamique additionnelle qui pr  domine sur les effets visqueux dans cette gamme de petites   chelles. Ce ph  nom  ne est intrins  quement li      la formation de structures plus petites observ  e dans l'  largissement des PDF et dans le champ de vorticit  . La RTI pouvant survenir dans des configurations de tourbillons    densit   variable, elle est examin  e en tant que m  canisme induisant ce ph  nom  ne. Notamment, la densit   spectrale d'un crit  re de cette instabilit   pr  sente   galement un pic dans la gamme d'  chelles o   la modification du spectre d'  nergie est observ  e. Cette observation sugg  re que les modifications de la dynamique aux petites   chelles induites par les effets    densit   variable r  sultent d'un ph  nom  ne pilot   par une dynamique RTI.

En utilisant un crit  re d'apparition des instabilit  s RTI, un spectre d'  nergie caract  ristique de ces instabilit  s au sein de l'  coulement est   labor  , ce qui permet d'apporter une explication qualitative    la forme observ  e des spectres    densit   variable. Plus pr  cis  ment, le spectre pr  sente une pente en  $k^{-2}$  dans la zone inertielle en raison du couplage entre la turbulence et la RTI. De plus, une correction additive    la loi de Kolmogorov en  $k^{2/3}$  est n  cessaire dans les plus petites   chelles, l   o   le pic d'  nergie est observ  .

### 3.6.2 Perspectives

En ce qui concerne les perspectives de cette   tude, une premi  re continuation consisterait      largir la gamme de param  tres afin d'affiner les r  sultats observ  s. Il serait notamment int  ressant de r  aliser de simulations couvrant une plage plus   tendue de rapports de densit    $s$  et de nombres de Reynolds  $Re$ , bas  s sur l'  chelle int  grale. Cela permettrait :

- De d  velopper des lois d'  chelles reliant  $Re$ ,  $Re_\lambda$  et  $s$ , ce qui permettrait de corriger les lois d'  chelles actuelles pour les moments  $S$  et  $F$  du champ de vitesse.
- De raffiner la valeur limite du rapport de densit    $s$  pour laquelle une augmentation de l'intermittence est observ  e.
- D'obtenir avec une plus grande pr  cision les coefficients du mod  le de pr  diction de modification du spectre d'  nergie.

De plus, l'augmentation de la r  solution des simulations permettrait d'affiner l'analyse des spectres et d'am  liorer le mod  le de pr  diction de la modification du spectre.

D'un autre c  t  , il serait   galement pertinent de prolonger les simulations jusqu'   obtenir un m  lange complet, c'est-  -dire un retour    un   tat    densit   constante. Dans cette optique, une analyse statistique similaire    celle employ  e dans cette   tude pourrait   tre effectu  e pour comparer l'  tat final    l'  tat initial. Cette approche permettrait d'  tudier l'impact sur l'  tat final de l'  coulement de l'introduction d'un champ de densit   inhomog  ne dans une turbulence forc  e.

## Chapitre 4

# Jet transitionnant vers la THI à densité variable

### Table des matières

---

4.1	Modélisation du jet . . . . .	85
4.2	Évolution temporelle du jet . . . . .	87
4.3	Spectres d'énergie . . . . .	88
4.4	Conclusions et perspectives . . . . .	91

---

Ce chapitre présente une étude d'un écoulement de jet à densité variable transitionnant vers un état de Turbulence Homogène Isotrope (THI) (à densité variable). L'accent est particulièrement mis sur les propriétés de la turbulence isotrope qui en résulte. Cette investigation complète l'étude principale exposée dans le chapitre 3, concernant la dynamique de la THI à densité variable.

Il est raisonnable de considérer que les rejets atmosphériques engendrent un écoulement turbulent quasiment isotrope à une distance éloignée de la zone d'émission du jet. Par conséquent, cette seconde étude vise à corroborer les conclusions obtenues par le biais de la modélisation THI. Cette validation repose sur la comparaison des données statistiques issues des DNS de THI avec les données issues des DNS de jets.

L'objectif de cette étude complémentaire est d'explorer si les effets liés aux variations de masse, observés avec la modélisation THI, sont également présents dans la turbulence découlant du jet. Plus précisément, l'attention est portée sur les différences de niveaux d'énergie constatées au sein de la partie inférieure du spectre d'énergie.

### 4.1 Modélisation du jet

Deux approches sont disponibles pour effectuer une DNS d'un écoulement de jet à densité variable turbulent. La première méthode consiste à effectuer une simulation de « jet spatial » en injectant un spectre d'énergie dans l'écoulement de base du jet, de manière que les instabilités se développent et la turbulence isotrope se forme dans une région spatiale donnée. Le forçage par injection du spectre d'énergie est ainsi maintenu tout au long de la simulation. Lorsqu'un solveur spectral est utilisé, il est nécessaire de mettre en place des artéfacts numériques, tels qu'une « zone fringe » discutée par SCHLATTER, ADAMS et KLEISER [73], afin de résoudre cet écoulement qui n'est pas périodique par nature. Cette approche présente un intérêt notable, car elle offre la possibilité de simuler l'ensemble du jet, permettant ainsi d'observer l'évolution des instabilités et des structures spatiales conduisant

à l'apparition de la turbulence. Toutefois, il est important de noter qu'elle engendre une consommation substantielle de ressource de calcul, surtout lorsque l'objectif consiste uniquement à examiner la turbulence isotrope découlant de ce processus. Ce constat est particulièrement prononcé lorsqu'elle est combinée avec l'utilisation d'une méthode de zone frange, laquelle requiert un quart de domaine de simulation supplémentaire pour d'affranchir de la restriction périodique.

L'option alternative réside dans la réalisation de simulations de « jets temporels ». Cette approche consiste à injecter une perturbation dans l'écoulement de base du jet, qui déstabilise l'intégralité du jet jusqu'à l'obtention de la turbulence isotrope sans recours à un forçage externe. Dans ce contexte, le jet subit une déstabilisation spatiale complète, ce qui équivaut à modéliser sa dynamique dans une zone spatiale spécifique où la turbulence prend forme. En considérant cette région suffisamment petite, l'application de conditions aux limites périodiques se justifie, simplifiant ainsi la mise en œuvre de cette méthode au sein du solveur spectral.

Cette approche simplifiée s'avère particulièrement adaptée pour mener une étude préliminaire de la transition d'un jet à densité variable vers la turbulence. En effet, elle offre la possibilité de se concentrer sur la zone de développement de la turbulence, ce qui réduit les besoins en ressource de calcul. Pour cette étude spécifique, c'est donc cette méthodologie qui est sélectionnée. Ce choix ne sous-entend aucunement que la première approche ne convient pas à ce contexte d'étude, bien au contraire. En réalité, il serait même intéressant de conduire une étude sur les jets spatiaux en perspectives de cette étude. Cependant, il convient de noter une limitation de cette méthode : en l'absence d'injection continue d'énergie, la turbulence engendrée est en déclin. Les conséquences de cette limitation sont discutées en fin de chapitre, mais elles n'entravent pas la capacité à tirer des conclusions sur les phénomènes observés.

Le profil de jet expérimental, discuté par GALLAIRE et CHOMAZ [30] et étendu au cas à densité variable par DI PIERRO [20], est choisi pour écoulement de base pour cette étude :

$$\bar{u}_x(r) = \frac{1}{1 + (\exp(\log 2r^2) - 1)^\beta}, \quad (4.1a)$$

$$\bar{u}_y(r, \theta) = -qr \exp(-(r/R_v)^\alpha) \sin \theta, \quad (4.1b)$$

$$\bar{u}_z(r, \theta) = qr \exp(-(r/R_v)^\alpha) \cos \theta, \quad (4.1c)$$

$$\rho(r) = 1 + (s - 1)u_x(r). \quad (4.1d)$$

Dans ces expressions, la variable  $q$  représente le nombre de swirl (taux de rotation),  $R_v = 0.719$  correspond à la taille du cœur du vortex, tandis que les paramètres  $\beta$  et  $\alpha$  régulent l'intensité du cisaillement selon l'axe et l'azimut respectivement. Au sein de cette étude, le paramètre  $q$  est fixé à zéro, de manière à éliminer les effets de rotation sur le développement de la turbulence. Quant au paramètre  $\beta$ , il est fixé à  $\beta = 3$ . Dans cette configuration, le jet rond est projeté dans la boîte cubique du solveur, avec la variable radiale définie comme  $r = \sqrt{y^2 + z^2}$ . L'axe du jet est alors aligné dans la direction  $x$  du domaine cartésien.

Ce champ de base est utilisé comme condition initiale et est perturbé par l'injection d'une perturbation aléatoire  $\mathbf{u}' = (0, u'_y, u'_z)^T$  d'amplitude comprise entre 0 et 1, dans les directions transverses. Ainsi, les simulations sont initialisées par

$$u_x(r) = \frac{1}{1 + (\exp(\log 2r^2) - 1)^3}, \quad (4.2a)$$

$$u_y(r) = 10^{-2}(2u'_y - 1), \quad (4.2b)$$

$$u_z(r) = 10^{-2}(2u'_z - 1), \quad (4.2c)$$

$$\rho(r) = 1 + (s - 1)u_x(r). \quad (4.2d)$$

L'incorporation de ces perturbations conduit à la transition du jet vers un écoulement turbulent en déclin, étant donné que le champ de base n'est pas forcé en continu, privant ainsi la turbulence d'une injection d'énergie.

En ce qui concerne les paramètres de simulation, de la même manière que pour la modélisation THI, les valeurs suivantes sont utilisées :

$$Re = 1000, \quad Sc = 1, \quad s \in [2, 8]. \quad (4.3)$$

Plus précisément, deux simulations sont étudiées : une à  $s = 2$ , représentative d'un jet de  $\text{CO}_2$ , et une à  $s = 6$ , représentative d'un jet de  $\text{SF}_6$ . Quant au maillage, les simulations sont réalisées au sein d'une boîte périodique de dimension  $(4\pi)^3$ , discrétisée avec une grille de 256 points dans chaque direction. La taille de la boîte est doublée par rapport aux simulations de THI, permettant ainsi au jet de se déstabiliser sans dépasser les limites du domaine dans les directions transversales [23]. De façon similaire aux simulations de THI, les simulations de jet sont identifiées par leur nombre de points  $N$  de discrétisation dans chaque direction et leur rapport de densité  $s$ . Les deux simulations sont alors désignées par « J256-2 » et « J256-6 ». Le préfixe "J" permet de différencier la simulation de jet de la simulation de THI « 256-6 ».

Il est important de rappeler, que tout comme dans le chapitre précédent, les grandeurs présentées dans ce chapitre, sont adimensionnées comme détaillé dans la section 1.2.2.

## 4.2 Évolution temporelle du jet

Suite à l'injection de la perturbation, le jet se déstabilise progressivement par la création de vortex au sein de l'écoulement jusqu'à atteindre le point critique d'éclatement tourbillonnaire. Ce comportement est caractérisé en détail par DI PIERRO et ABID [22] dans le cas à densité constante. La forme du jet au fil du temps est présentée dans les figures 4.1 et 4.2, pour les simulations J256-2 et J256-6, respectivement, à travers les isosurfaces du champ de densité dans la section  $xz$ . Des instabilités se développent à l'interface entre le jet lourd et le milieu environnant de densité inférieure, évoluant progressivement jusqu'à provoquer l'éclatement complet du jet à l'instant  $T_\Omega$ . Cet instant caractéristique de l'éclatement tourbillonnaire correspond au moment où l'énstrophie  $\int_\Omega \omega^2 dV$  atteint un maximum. Pour  $s = 2$ , cet instant correspond à  $t = 50.35$ , tandis que pour  $s = 6$ , il est enregistré à  $t = 42.25$ . Il est donc possible de conclure que le rapport de densité exerce une influence accélératrice sur le processus de déstabilisation du jet. Ce comportement est prévisible étant donné que le taux de croissance de ces instabilités est croissant avec le rapport de densité  $s$  [20, 42].

L'évolution des caractéristiques scalaires du jet au cours de la simulation J256-6 est présentée dans la figure 4.3. Les quantités telles que l'énstrophie, le degré d'isotropie, le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor et l'écart type du champ de densité, représentant le taux de mélange  $y$  sont tracées. Le temps est normalisé par le temps  $T_\Omega$  associé à l'éclatement tourbillonnaire de manière que le pic maximal d'énstrophie apparaisse à  $t/T_\Omega = 1$ . Ces courbes permettent ainsi de décrire et de comprendre, dans une première approximation l'évolution turbulente du jet.

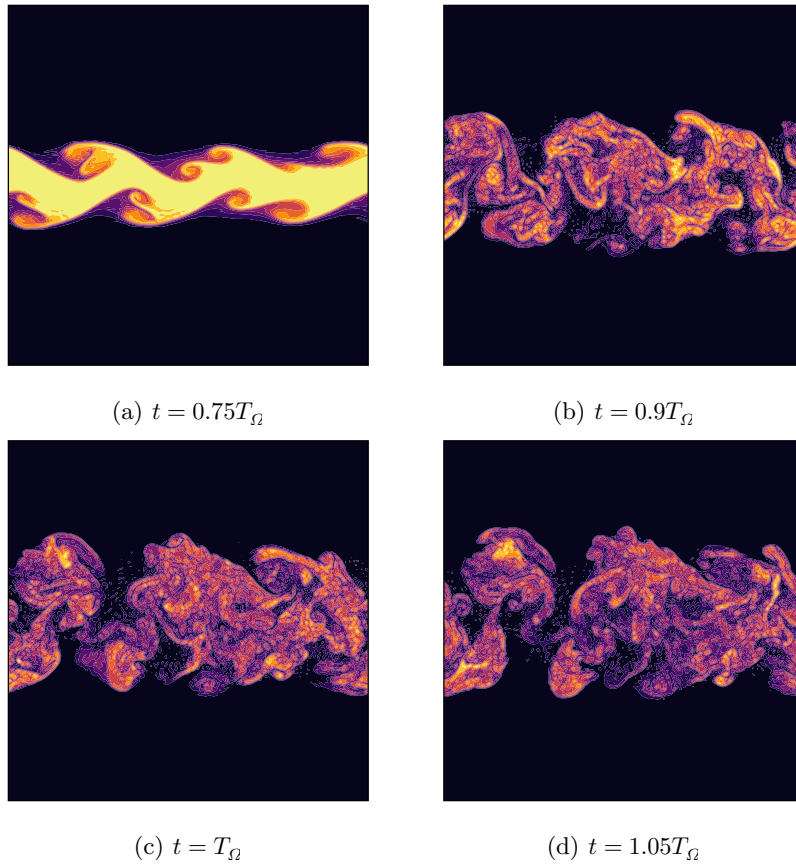
Dans un premier temps, il est à noter que la dynamique du jet évolue peu jusqu'à l'instant  $t = 0.8T_\Omega$ . À cet instant, l'énstrophie augmente fortement jusqu'à atteindre un maximum à  $t = T_\Omega$ . Cette augmentation est reliée à la déstabilisation du jet par la création de nombreux tourbillons de différentes tailles qui peuvent être observées dans les figures 4.1 et 4.2. Un comportement similaire est observé dans le cas d'un jet hélicoïdal (à densité constante) par DI PIERRO et ABID [22].

Lors de cette crise tourbillonnaire, une chute significative du nombre de Reynolds turbulent est observée. Initialement proche de 600,  $Re_\lambda$  décroît jusqu'à atteindre environ 200, une valeur généralement associée à une THI d'un écoulement à  $Re = 1000$ . Ensuite, pour  $t/T_\Omega > 1$ , le nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$  semble stagner. Cette première observation suggère que le jet évolue vers une dynamique de type THI après éclatement.

Ce résultat est confirmé par l'évolution du degré d'isotropie. Initialement l'isotropie augmente jusqu'à atteindre 1.6, ce qui indique une répartition non uniforme de l'énergie à travers les différentes directions. Progressivement, cette valeur converge vers 1, correspondant à une isotropie totale de l'écoulement. Après l'éclatement tourbillonnaire, elle atteint notamment une valeur de 1.03. Pour rappel, un écoulement est considéré comme suffisamment isotrope lorsque cette mesure se situe entre 1.05 et 0.95.

L'évolution de la turbulence est également observée à travers le mélange, caractérisé par l'écart type  $\sigma(\rho)$  du champ de densité. Encore une fois, jusqu'à la crise tourbillonnaire à  $t = 0.8T_\Omega$ , cette quantité reste quasiment constante. Au-delà de cet instant, elle commence à décroître, ce qui est synonyme d'un mélange provoqué par les tourbillons développés.





**Figure 4.1** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de jet temporel à densité variable J256-2.  $T_\Omega$  représente l'instant de l'éclatement tourbillonnaire, associé au maximum d'entrophie.

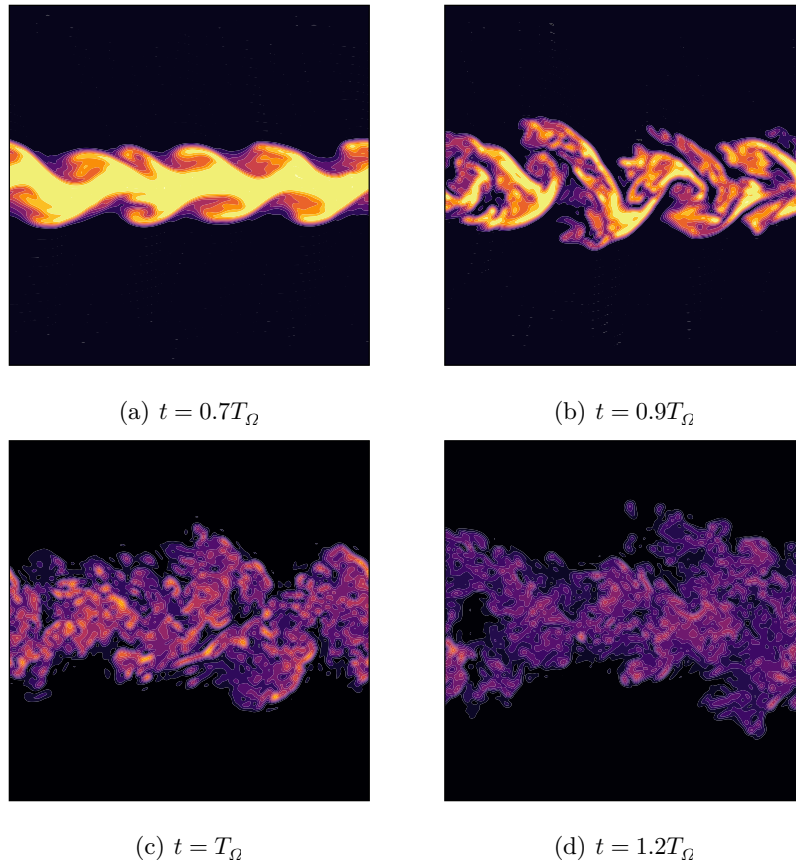
Il convient de noter que la quantification de la turbulence est limitée et approximative en se basant uniquement sur ces courbes d'évolution temporelle des quantités scalaires. La section suivante présente les spectres d'énergie associés afin d'obtenir une meilleure perspective sur le développement de la turbulence lors de la déstabilisation du jet.

### 4.3 Spectres d'énergie

La figure 4.4 illustre l'évolution des spectres d'énergie au cours des simulations J256-2 et J256-6. Initialement, les spectres présentent des oscillations correspondant aux premiers modes instables qui donneront lieu à la transition vers la turbulence. Avec la crise tourbillonnaire, le spectre se remplit et présente la forme en  $E(k) \sim k^{-5/3}$  dans la zone inertielle aux instants qui suivent l'éclatement tourbillonnaire.

La figure 4.5 présente l'évolution de la pente du spectre  $\alpha_E$  dans la zone inertielle, en comparaison de l'évolution de l'entrophie. La pente est calculée en faisant une interpolation par un polynôme de degré 1 de  $\ln E(k)$  entre les modes  $\ln k_i$  associés à l'échelle intégrale et l'échelle de Taylor. L'évolution de la pente n'est pas tracée pour les premiers instants,  $t < 0.4T_\Omega$ , étant donné qu'en début de simulation, l'échelle de Taylor n'a pas de sens physique sans turbulence développée. Le coefficient  $\alpha_E$  converge vers  $-\frac{5}{3}$  après éclatement tourbillonnaire, ce qui est caractéristique de la loi de Kolmogorov pour la THI. À nouveau, ce résultat confirme la transition du jet vers une dynamique de type THI.

Il convient désormais de s'interroger sur la présence, dans le spectre d'énergie, des modifications aux petites échelles attribuées aux effets de RTI et observées au cours de l'étude de la THI à densité variable. Le panneau supérieur de la figure 4.6 présente les spectres d'énergie issus des simulations de



**Figure 4.2** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de jet temporel à densité variable J256-6.  $T_\Omega$  représente l’instant de l’éclatement tourbillonnaire, associé au maximum d’entrophie.

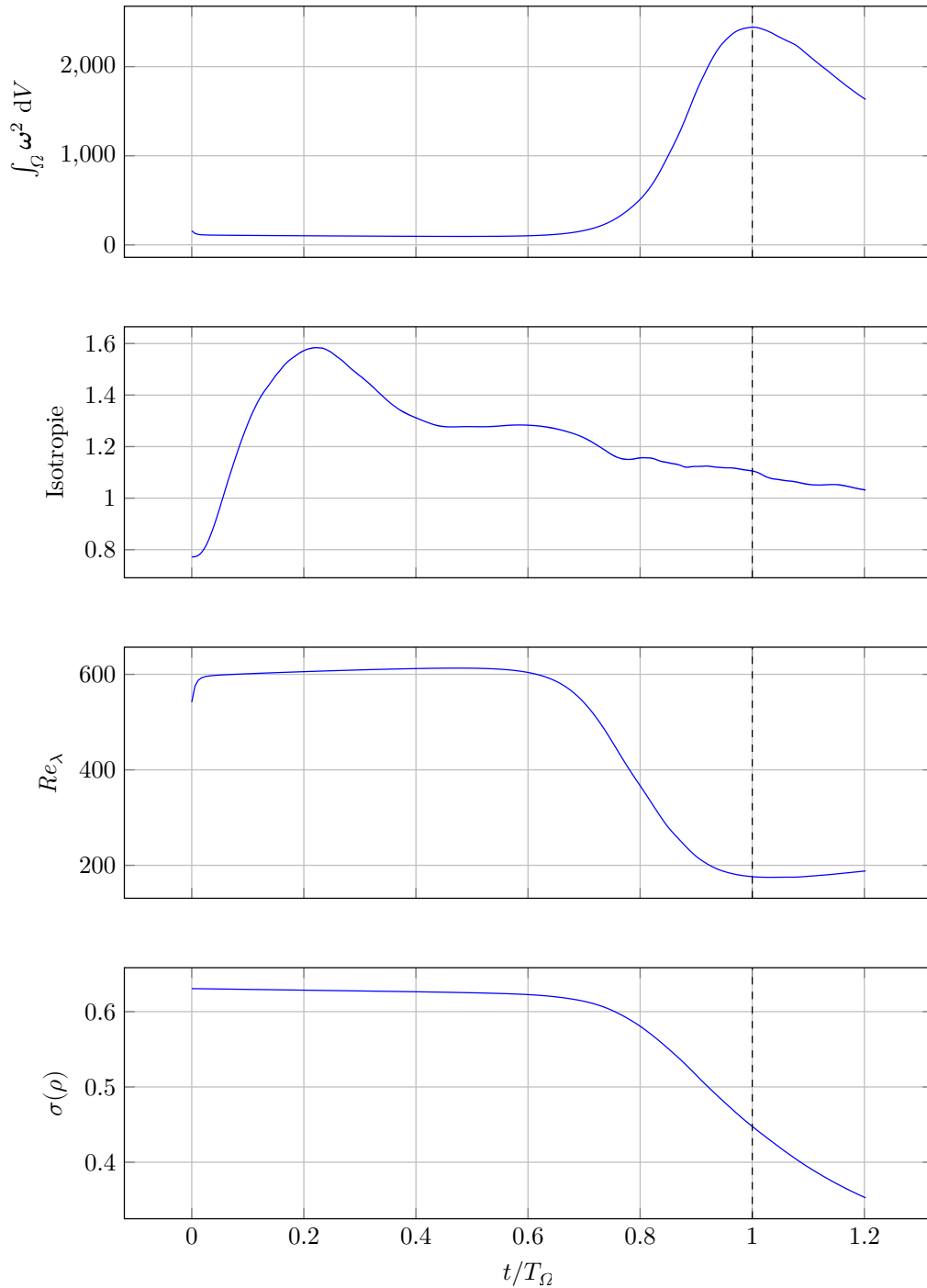
jet, limités à la zone inertielle. Ces spectres sont calculés en moyennant les données sur une période  $t \in [0.99T_\Omega, 1.01T_\Omega]$  de 100 itérations.

De plus, les spectres sont comparés avec le spectre d’énergie de la DNS de THI à densité constante (représenté en pointillés), normalisé de manière que le mode associé à l’échelle intégrale ait la même amplitude que celui du spectre de jet associé. Cette comparaison révèle une augmentation notable de l’énergie en fin de zone inertielle dans le spectre à  $s = 6$ . Une augmentation légère est également perceptible dans les derniers modes avant la coupure visqueuse, cependant cet effet est bien moins prononcé que celui observé dans les spectres de THI (voir figure 3.18).

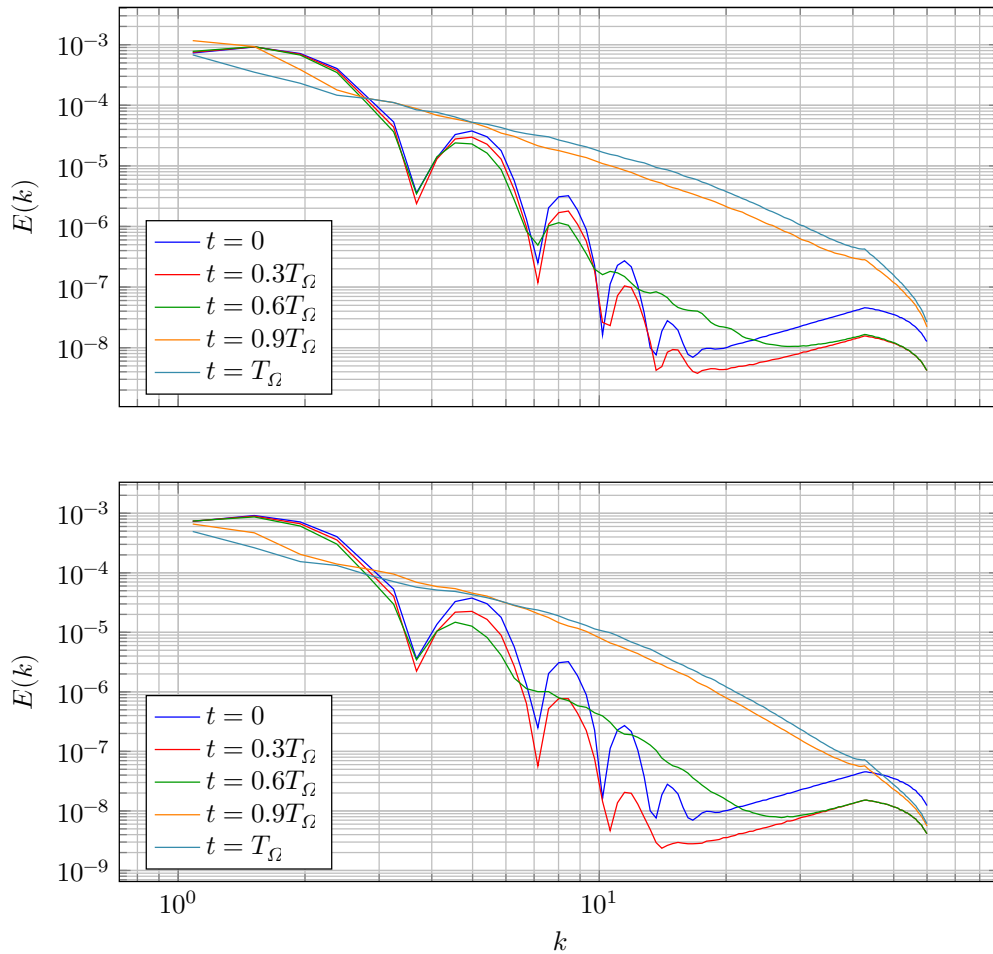
Les lignes verticales en pointillés, qui délimitent les modes associés aux échelles de Taylor, montrent que le rapport de densité a également un effet sur cette échelle. Cette dernière est inversement proportionnelle à  $s$ . Les effets de densité variable dans le jet ont donc, comme dans le cas de la THI, un effet similaire au nombre de Reynolds : ils repoussent la coupure visqueuse par l’introduction d’un nouveau phénomène dominant aux petites échelles. L’étude de la THI à densité variable, suggère que ce phénomène est une dynamique liée à la RTI.

Le panneau inférieur de la figure 4.6 présente la densité spectrale d’énergie du critère d’instabilité RTI, défini dans l’équation (3.24). Les spectres présentent une forme similaire à ceux de la THI, avec un pic d’énergie correspondant aux plus petites échelles de la zone inertielle.

Cependant, en raison de la non-stationnarité du jet temporel, il n’est pas possible d’approfondir la comparaison entre la turbulence issue du jet et celle générée par la modélisation THI.



**Figure 4.3** : Évolution de l'entropie, du degré d'isotropie ([18], annexe D), du nombre de Reynolds turbulent  $Re_\lambda$ , ainsi que de l'écart type du champ de densité  $\sigma(\rho)$ , lors de la DNS de jet à densité variable J256-6 :  $Re = 1000$ ,  $s = 6$ ,  $Sc = 1$ ,  $N = 256$ .  $T_\Omega$  représente l'instant de l'éclatement tourbillonnaire, associé au maximum d'entropie.



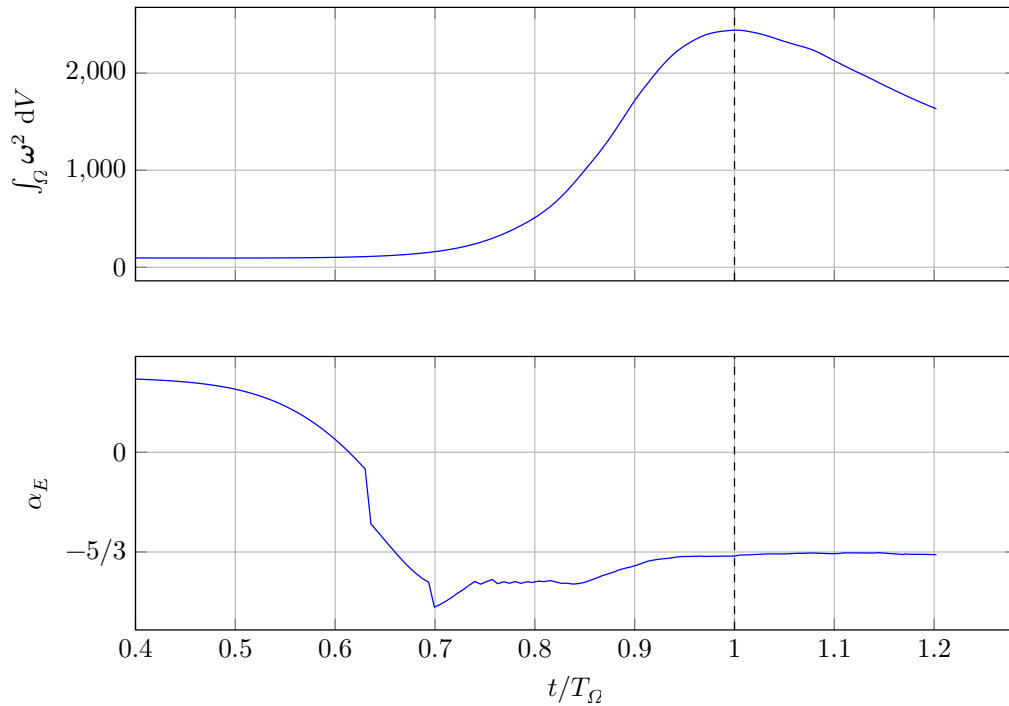
**Figure 4.4** : Évolution du spectre d'énergie lors des DNS de jet temporel à densité variable : (haut) J256-2; (bas) J256-6.  $T_\Omega$  représente l'instant de l'éclatement tourbillonnaire, associé au maximum d'entrophie.

#### 4.4 Conclusions et perspectives

Cette étude complémentaire à celle de la turbulence isotrope à densité variable permet de valider l'utilisation d'une modélisation THI pour étudier l'interaction des structures avec les variations de densité. En effet, l'étude temporelle montre que les jets évoluent vers un écoulement turbulent et isotrope suite à l'éclatement tourbillonnaire. De plus, les spectres résultants présentent des caractéristiques similaires à ceux obtenus avec les DNS de THI. Notamment, une remontée d'énergie est observée dans les dernières échelles de la zone inertielle et l'échelle de Taylor diminue lorsque le rapport de densité augmente. La densité spectrale d'énergie du critère d'instabilité RTI suggère que ces modifications sont une conséquence d'une dynamique pilotée par cette instabilité, tout comme pour la THI.

Néanmoins, cette étude de jet temporel du jet ne permet pas une analyse quantitative des structures du jet et de leur interaction avec les variations de densité. Après la phase turbulente d'éclatement, le spectre d'énergie nouvellement développé diminue rapidement. Cela conduit à une configuration de turbulence isotrope en déclin, accéléré davantage par le processus de mélange.

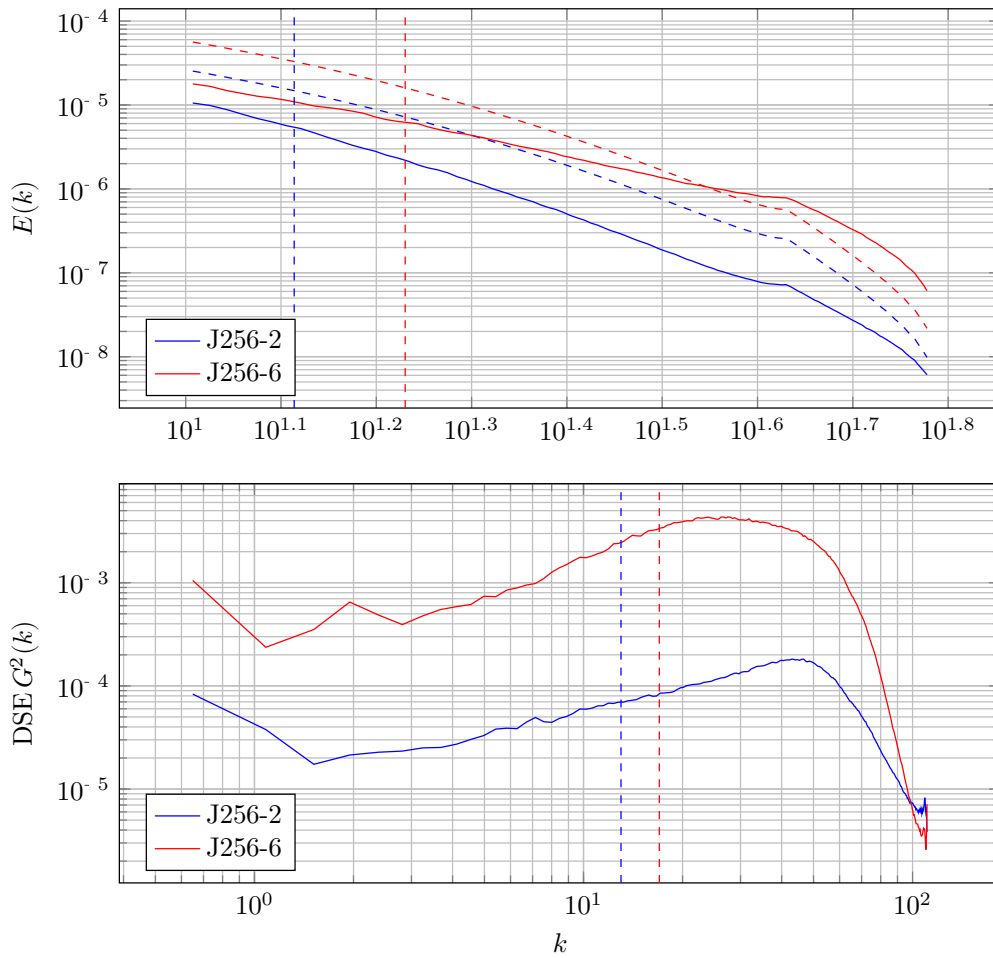
Pour résoudre cette limitation, il serait intéressant dans un premier temps, de conduire des simulations avec une approche perturbative où le champ de base est fixé de façon à forcer une injection d'énergie. Le maintien de la turbulence permettrait notamment de réaliser des études statistiques et d'analyser les structures de la turbulence, comme cela a été fait dans l'étude de la THI.



**Figure 4.5** : Évolution de la pente du spectre d'énergie comparée à l'évolution de l'enstrophie lors de la DNS de jet à densité variable J256-6.  $T_{\Omega}$  représente l'instant de l'éclatement tourbillonnaire, associé au maximum d'enstrophie. La pente  $\alpha_E$  est calculée entre l'échelle intégrale et l'échelle de Taylor.

Au-delà de l'étude des structures, une perspective de continuité possible consisterait à analyser la réponse du jet à densité variable lors de l'injection d'un spectre d'énergie et à comparer cette réaction à celle observée dans le cas d'un jet à densité constante. Pour mettre en œuvre cette approche, il serait nécessaire de réaliser des simulations de jets spatiaux, où la turbulence est générée dans une région spécifique de l'écoulement est maintenue grâce à l'énergie injectée par le jet. Cette approche permettrait de quantifier l'impact des variations de densité sur les instabilités convectives/absolues, ainsi que leurs signatures sur la turbulence aux temps longs [7].

En ce qui concerne la dynamique du jet indépendant de la turbulence, l'étude de ce chapitre ne révèle pas de résultats nouveaux. Cependant, il semble que le temps d'éclatement tourbillonnaire  $T_{\Omega}$  soit une fonction décroissante du rapport de densité. Pour obtenir une relation plus précise entre  $s$  et  $T_{\Omega}$ , il serait intéressant de réaliser davantage de simulations avec différents rapports de densité afin d'établir une loi d'échelle reliant  $T_{\Omega}$  et  $s$ .



**Figure 4.6** : Spectres d'énergie (haut) comparés à la densité spectrale du critère RTI (bas) lors de l'éclatement tourbillonnaire des DNS de jet à densité variable. Le critère est défini par l'équation (3.21) page 75. Les lignes verticales délimitent les modes associés aux échelles de Taylor. Dans le panneau supérieur, les courbes en pointillés représentent les spectres d'énergie de la DNS de THI à densité constante 256-1, normalisés de façon à ce que le mode associé à l'échelle intégrale ait la même amplitude que celui du spectre de jet associé.

# Chapitre 5

## Conclusions et perspectives

### Table des matières

---

5.1	Méthodes numériques . . . . .	95
5.2	Turbulence Homogène Isotrope . . . . .	95
5.3	Jet à densité variable . . . . .	96
5.4	Perspectives . . . . .	96

---

Ce chapitre final propose une synthèse complète des travaux menés au cours de cette étude, mettant en lumière les résultats obtenus. De plus, il évoque les axes de recherche qui méritent d'être explorés dans le prolongement de ces travaux.

Cette thèse a pour objet l'analyse et la caractérisation des effets à densité variable sur la dynamique turbulente d'un écoulement incompressible. Cette étude s'inscrit dans un contexte plus vaste de modélisation des écoulements associés aux rejets atmosphériques, qui se distinguent par leurs faibles vitesses et leurs gradients de densité de grande amplitude. Dans ce cadre, une formulation originale est adoptée pour la modélisation, dans laquelle l'écoulement est considéré comme incompressible tout en considérant de grandes variations de masse volumique et en traitant le champ de densité comme un scalaire actif de l'écoulement. Ainsi, la turbulence à densité variable est modélisée par un écoulement incompressible, isotherme, et non réactif, impliquant un mélange binaire de fluides newtoniens. D'un point de vue mathématique, cette modélisation se formule à travers le système d'équations de Kazhikhov–Smagulov, qui sont équivalentes aux équations de Navier–Stokes incompressibles avec diffusion de masse par loi de Fick, mais négligeant les termes d'ordre 2 en diffusion.

L'analyse de l'interaction entre la turbulence et les fortes variations de densité reste une problématique relativement peu explorée, cette étude met l'accent sur l'analyse de la dynamique fondamentale de la Turbulence Homogène Isotrope (THI) à densité variable. Afin d'atteindre cet objectif, cette étude repose sur la réalisation de Direct Numerical Simulation (DNS, *Simulation Numérique Directe*) de THI à densité variable. Ces simulations sont ensuite comparées à une DNS à densité constante et soumises à des analyses statistiques et spectrales dans le but de caractériser les effets de densité variable sur la turbulence.

## 5.1 Méthodes numériques

L'accomplissement de DNS de turbulence impliquant d'importantes variations de masse volumique requiert l'utilisation d'une méthode numérique robuste. L'hypothèse de variations suffisamment régulières, bien qu'importantes, permet l'application de méthodes spectrales, offrant ainsi une efficacité numérique optimale pour la discrétisation spatiale des équations. Les méthodes spectrales sont associées à une méthode de projection, pour la résolution du problème incompressible, ainsi qu'à un schéma d'intégration temporelle d'ordre élevé.

Afin de capturer la dynamique de manière robuste et efficiente, l'intégration temporelle utilise un schéma semi-implicite de Crank–Nicholson qui implique l'inversion d'un opérateur à coefficients variables, notamment en  $1/\rho(\mathbf{r})$ . Les opérateurs liés à la projection et au traitement implicite sont inversés à l'aide d'une technique de préconditionnement appliquée à des solveurs de Krylov. Cette méthode utilise l'inverse de l'opérateur associé à densité constante comme préconditionneur et a été valorisée par la publication d'un article : Loïc REYNIER et al. « A preconditioning for the spectral solution of incompressible variable-density flows ». In : *Computers & Fluids* 266 (nov. 2023), p. 106024. ISSN : 0045-7930. DOI : 10.1016/j.compfluid.2023.106024. URL : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.106024>.

Ainsi, les DNS utilisent un schéma semi-implicite de type Runge–Kutta 2/Crank–Nicholson (RK2/CN) associé à un solveur GMRES préconditionné. Les schémas d'ordres supérieurs permettant d'obtenir des ordres supérieurs sur les champs de vitesse et de densité, cependant, la résolution de la pression reste limitée à un ordre 2.

## 5.2 Turbulence Homogène Isotrope

Dans le but de couvrir une gamme de paramètres représentatifs des écoulements de type jets atmosphériques, les DNS de THI à densité variable sont réalisées avec un nombre de Reynolds de 1000, un nombre de Schmidt de 1 et un rapport de densité compris entre 2 ( $\text{CO}_2$ ) et 6 ( $\text{SF}_6$ ). La turbulence est initiée et entretenue à l'aide d'une méthode de forçage, inspirée de la méthode de Lundgren et adaptée aux équations à densité variable.

En ce qui concerne les effets à densité variable, ils sont introduits en injectant un champ de densité inhomogène dans un écoulement pleinement turbulent obtenu par le biais d'une DNS à densité constante. Ce profil initial de densité prend la forme d'une sphère dans laquelle le fluide dense est confiné, entouré par le fluide moins dense.

L'analyse statistique des données sur une période temporelle où la turbulence peut être considérée comme statistiquement stationnaire et où les effets à densité variable demeurent significatifs, révèle que cette introduction altère la dynamique turbulente. En particulier, le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor subit une décroissance proportionnelle au rapport de densité. Cependant, l'analyse des PDF du champ de vitesse montre un élargissement proportionnel au rapport de densité, suggérant que les effets à densité variable induisent la génération de structures plus fines, malgré la diminution du nombre de Reynolds turbulent. Les moments de skewness et de flatness du champ de vitesse subissent également une modification qui n'est pas capturée par les lois d'échelles à densité constante. Notamment, les PDF ont tendance à devenir davantage symétriques et une augmentation de l'intermittence est observée avec l'augmentation du rapport de densité.

La génération de structures plus petites, par l'introduction du champ de densité inhomogène, est confirmée par la visualisation de l'écoulement à travers les isosurfaces de vorticit  : les écoulements à densité variable présentent des structures plus petites que la simulation de référence à densité constante. L'analyse spectrale confirme également ce résultat en montrant une diminution de l'échelle de Taylor avec le rapport de densité, ce qui repousse la coupure visqueuse à des échelles plus petites. Le comportement aux grandes échelles et dans la zone inertielle est quant à lui peu impacté. La loi de Kolmogorov est préservée, à l'exception des échelles les plus petites de la gamme inertielle. Dans cette gamme d'échelles, une augmentation de l'énergie est observée et cette augmentation est plus prononcée lorsque le rapport de densité augmente.



Ce comportement suggère la présence d'un phénomène supplémentaire dominant dans cette gamme d'échelles, lié à la modification des échelles de Taylor et de coupure. En se basant sur la théorie d'un critère de Rayleigh–Taylor Instability (RTI, *Instabilité de Rayleigh–Taylor*), ce phénomène est identifié comme une dynamique pilotée par les instabilités RTI des plus petits tourbillons. Notamment, un modèle de spectre est élaboré à partir de ce critère dans le but de prédire les modifications de pente observées.

Les résultats obtenus concernant la THI ont été soumis pour publication dans la revue *Physical Review Fluids*, où ils sont en cours de révision.

### 5.3 Jet à densité variable

La THI, bien qu'étant une modélisation couramment utilisée pour les études fondamentales, demeure une représentation idéalisée d'un écoulement turbulent. Afin de vérifier si les résultats obtenus sont effectivement caractéristiques de la dynamique d'un rejet atmosphérique, des DNS de jet temporel sont réalisés avec des paramètres similaires à ceux des simulations de turbulence. Pour cela, des perturbations sont introduites dans un profil de jet expérimental, ce qui provoque sa déstabilisation et sa transition vers un régime turbulent.

L'analyse des données révèle qu'après l'éclatement tourbillonnaire, le jet transitionne vers une dynamique similaire à celle de la THI. Le spectre résultant présente une forme similaire à celui obtenu avec la modélisation THI, bien que les effets à densité variable soient moins prononcés. Cependant, le spectre du critère RTI montre un pic d'énergie dans les dernières échelles de la zone inertielle, indiquant ainsi la prédominance d'un phénomène RTI.

L'étude du jet à densité variable confirme donc la légitimité de l'emploi d'une modélisation THI pour cette étude. Cependant, en raison du déclin rapide de la turbulence du jet temporel, il n'est pas possible d'effectuer une analyse plus approfondie de ses structures à partir des données des DNS réalisées. Pour cela, une étude axée sur un jet spatial serait nécessaire.

### 5.4 Perspectives

Les outils et la méthodologie mis en œuvre au cours de ce travail n'ont encore livré que leurs tout premiers résultats. Tant sur le plan de la THI que sur le plan du jet, de nombreuses perspectives de recherche s'ouvrent.

En ce qui concerne l'étude de la THI, il serait intéressant, dans un premier temps d'élargir le jeu de données en réalisant davantage de simulations avec différents nombres de Reynolds et de rapports de densité. Ces données pourraient être utilisées pour développer les lois d'échelle similaires à celles disponibles dans la littérature pour les écoulements à densité constante. Il serait notamment intéressant d'établir une relation entre le nombre de Reynolds turbulent, le rapport de densité et le nombre de Reynolds global. Cette relation permettrait ensuite d'adapter les lois des moments du champ de vitesse, afin qu'elles puissent prendre en compte les effets à densité variable.

Un jeu de données plus étendu offrirait également la possibilité de mieux affiner les coefficients du modèle de prédiction de modification du spectre d'énergie. Par ailleurs, des simulations à résolution plus élevée ( $512^3$  au lieu de  $256^3$ ) sont en cours afin de préciser davantage ce modèle. Il est essentiel de noter que les premiers spectres obtenus en résolution  $512^3$  présentent des caractéristiques similaires à ceux exposés dans ce document.

D'un autre côté, il serait également pertinent de prolonger les simulations de THI obtenir un mélange complet, c'est-à-dire, un retour à un état à densité constante. Cette nouvelle étude permettrait d'examiner si l'introduction d'un champ inhomogène de densité a une incidence sur l'état final de l'écoulement.

En ce qui concerne le jet, l'étude présentée dans ce travail ne permet pas d'examiner en détail les structures de la turbulence dans le jet à densité variable. Il serait alors intéressant de réaliser des simulations de jets spatiaux où la turbulence générée est maintenue par une injection d'énergie. Cela permettrait d'analyser de façon approfondie les structures turbulentes générées et de les comparer à celles de la THI.

Dans le but de mieux appréhender les effets des variations de densité sur la dynamique transitionnelle, une voie de recherche potentielle pourrait impliquer l'analyse de la réponse des structures du jet à densité variable lors de l'introduction d'une perturbation. En introduisant un spectre spécifique dans l'écoulement et en comparant ensuite la réponse à celle observée dans un jet à densité constante, cette approche chercherait à évaluer de manière quantitative l'influence des variations de densité sur les instabilités convectives/absolues du jet.

# Annexe A

## Stockage des données

Cet annexe offre un aperçu détaillé de la méthode de stockage et d'accès aux données et justifie la transition d'une interface d'accès fait maison vers une interface HDF5 [34]. Les informations présentées ici peuvent être utiles pour les personnes intéressées à entreprendre des campagnes de calcul similaires.

L'analyse statistique de la turbulence nécessite la sauvegarde périodique des champs, ce qui génère d'importantes quantités de données. Pour donner une idée de l'échelle, avec une taille de maillage de  $256^3$ , un champ stocké en double précision occupe 125 MiB. Par conséquent, sauvegarder un instantané des cinq champs d'écoulement ( $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T, \rho, p$ ) nécessiterait 640 MiB d'espace de stockage. À chaque doublement de la taille du maillage, la taille de stockage augmente d'un facteur de  $2^3$ . Ainsi, un instantané d'écoulement à une résolution de  $512^3$  requiert 5 GiB de stockage. En termes de considérations de stockage, l'approche optimale consisterait à effectuer l'analyse statistique pendant le processus de simulation et à ne sauvegarder que les résultats utilisés. Cependant, conserver l'accès aux données d'écoulement permet des analyses supplémentaires sans avoir besoin de refaire les calculs. Ainsi, la préférence va à la sauvegarde des instantanés d'écoulement pour garantir l'accessibilité future à l'ensemble des données d'écoulement. À cet égard, toutes les données de simulation sont disponibles sur demande<sup>1</sup>.

Le tableau A.1 illustre l'espace disque occupé par chaque simulation traitée dans cette étude.

---

<sup>1</sup>Étant donné les importantes tailles de fichiers, le transfert de données se fera probablement via BitTorrent.

Simulations	Résolution	Instantanés	≈ Taille (GiB)
256-1	$256^3$	700	350
256-2	$256^3$	600	550
256-4	$256^3$	600	850
256-4	$256^3$	600	850
256-6	$256^3$	400	650
256-8	$256^3$	600	1100
256-0.25	$256^3$	600	850
256-0.5	$256^3$	400	550
J256-2	$256^3$	300	350
J256-4	$256^3$	300	350
J256-6	$256^3$	300	350

**Table A.1** : Espace disque occupé par chaque simulation réalisée au cours de cette étude (après post-traitement). Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

## A.1 D'une interface personnalisée à HDF5

Pendant une simulation, le code de DNS `POUSSINS` sauvegarde régulièrement des instantanés du champ d'écoulement sous forme d'un format binaire connu sous le nom de `FORTRAN unformatted`. Initialement, les fichiers binaires étaient convertis en tableaux `NumPy` [39] et ensuite stockés à l'aide de la fonctionnalité de sérialisation d'objets `pickle` de Python. Par le biais d'une interface de programmation orientée objet, les données d'écoulement étaient récupérées au moyen d'un objet `Simulation`, qui englobait plusieurs objets `Snapshot`. Lors de l'étape de post-traitement, chaque quantité nouvellement calculée était intégrée en tant qu'attribut dans son instantané (`Snapshot`) correspondant, qui était ensuite sérialisé comme décrit ci-dessus.

Cette interface d'accès aux données remplissait correctement son rôle pour accéder et post-traiter un nombre limité d'instantanés. Cependant, ses limitations sont devenues évidentes lors du traitement de simulations de turbulence contenant plusieurs centaines d'instantanés. Notamment, l'incapacité à accéder aux données sans charger simultanément tous les champs en mémoire posait une contrainte significative. Dans le but d'améliorer l'accès aux données parallélisé lors du post-traitement, nous avons d'abord expérimenté avec notre ancienne interface en introduisant une interface parallèle en utilisant la bibliothèque `multiprocessing` de Python. Cependant, nous avons rencontré des défis pour gérer efficacement le chargement dynamique de la mémoire par cette approche. En conséquence, nous avons exploré une solution alternative en utilisant l'interface `OpenMPI`, plus précisément le package Python `mpi4py`, ce qui nous a amenés au format de données hiérarchiques `HDF5`. Les bibliothèques associées à `HDF5` offrent une IPA `OpenMPI` qui facilite sa mise en œuvre parallèle, rendant ainsi (presque) sans effort la réalisation d'implémentations parallèles.

## A.2 Avantages et limites du format de fichier HDF5

`HDF5` offre un format de données véritablement hiérarchique, similaire à un système de fichiers, où les ressources peuvent être accédées en utilisant la syntaxe POSIX `/chemin/vers/la/ressource`. Cela permet d'organiser les données de manière structurée. Chaque ressource est soit (1) un jeu de données (`dataset`), qui est un tableau multidimensionnel typé, soit (2) un groupe (`group`), qui est une structure conteneur pouvant contenir des `dataset` et d'autres `group`. Dans l'analogie du système de fichiers, un groupe correspond à un dossier, tandis qu'un jeu de données est semblable à un fichier. Dans notre application spécifique, le champ de vitesse du 400e instantané peut être accédé en utilisant le chemin<sup>2</sup>/`snaps/400/u`. De plus, `HDF5` permet d'inclure des métadonnées pour décrire chaque groupe ou jeu de données. Cela, associé à la structure conviviale de type système de fichiers, facilite le partage des données avec des tiers qui ne sont peut-être pas familiers avec votre travail spécifique.

En ce qui concerne le partage de données, `HDF5` propose des IPA pour divers langages de programmation tels que C, C++, `FORTRAN`, Python et Rust. Cette large gamme de support linguistique simplifie le processus de partage de données avec des tiers travaillant avec différents codes de simulation ou de post-traitement.

En termes de performances, `HDF5` prend en charge l'accès dynamique et parallélisé aux ressources. Cet avantage nous a incités à adopter cette bibliothèque, surtout compte tenu des limites de notre interface précédente, qui exigeaient le chargement de toutes les données d'instantanés en mémoire pour le post-traitement, qu'il s'agisse d'une exécution séquentielle ou parallèle.

Pour certaines personnes, y compris moi-même, la structure de type système de fichiers peut être considérée comme un inconvénient. L'idée d'implémenter un système de fichiers au sein d'un système de fichiers peut sembler complexe et sujette à des problèmes. À la place, opter pour une structure qui sépare les données en dossiers et/ou en plusieurs fichiers pour chaque tableau peut offrir une organisation tout aussi intuitive sans recourir à une bibliothèque complexe. Cependant, l'avantage d'utiliser une bibliothèque disponible immédiatement (en particulier dans une thèse où le temps de développement non scientifique est limité) et qui automatise l'accès parallèle et dynamique aux données, l'emporte sur l'inconvénient mentionné ci-dessus.

---

<sup>2</sup>Une explication détaillée de la structure de données est fournie dans la prochaine section.

Le principal inconvénient des fichiers HDF5 est le risque de corruption. Une interruption brutale d'un processus d'écriture peut entraîner une perte de données et le risque de perte semble plus élevé pendant les opérations d'écriture parallèles.

Le deuxième inconvénient est l'incapacité de supprimer les données stockées. La suppression fonctionne de manière similaire à un système de fichiers, où seul le lien entre les données et la table des partitions est supprimé : les données restent présentes et la taille du fichier ne diminue pas. Il est nécessaire d'utiliser des outils tels que `h5repack` pour reconstruire le fichier et libérer de l'espace de stockage.

Pour conclure cette section sur les avantages et les inconvénients de ce format de données, je dirais que HDF5 n'est pas la solution optimale en raison de son manque d'opacité et de sa complexité inhérente. Cependant, il reste un excellent choix pour toute personne souhaitant générer une base de données partageable et portable. À mon avis, la solution idéale consisterait en une structure utilisant des dossiers et des fichiers simples pour différents groupes et tableaux. Cela offrirait une opacité totale sur les données tout en limitant le risque de corruption. Des fichiers supplémentaires peuvent être ajoutés pour les métadonnées et pour spécifier comment le logiciel de visualisation, par exemple, peut naviguer dans la base de données. Cependant, pour atteindre cet objectif, nous devrions (1) convenir d'un format binaire standard, car stocker de tels volumes en format texte n'est pas réalisable, et (2) développer une interface d'accès aux données parallèle et dynamique. Jusqu'à ce qu'une telle solution soit mise en œuvre, HDF5 remplira très bien ce rôle.

### A.3 Structures des données

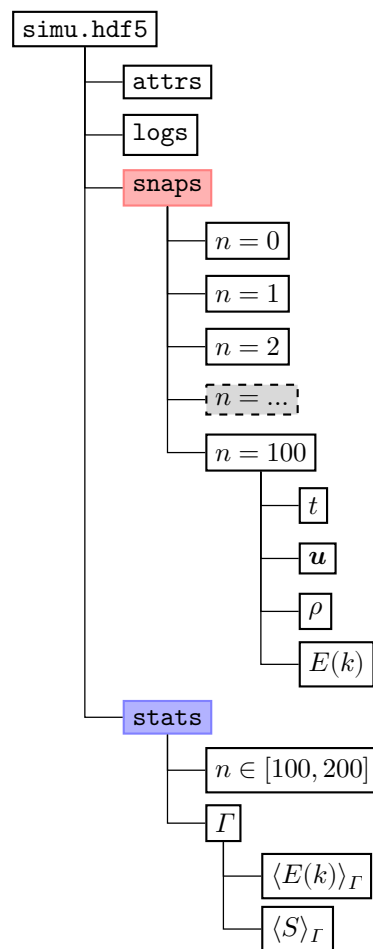
Comme mentionné précédemment, les données sont organisées dans une structure de type système de fichier de la forme `/chemin/vers/la/ressource`. La figure A.1 illustre le contenu d'un fichier HDF5 qui stocke les données d'une simulation. L'organisation de cette hiérarchie comprend quatre groupes principaux :

- **attrs** : Ce groupe<sup>3</sup> contient les variables de configuration du code `POUSSINS`, utilisées pour l'initialisation de la simulation.
- **logs** : Dans ce groupe sont stockées les informations calculées au cours de la DNS qui servent à surveiller la convergence de la simulation. Cela inclut des données telles que l'énergie cinétique totale, la divergence du champ de vitesse, le degré d'isotropie, des informations sur la convergence des solveurs itératifs, ainsi que le coefficient de forçage.
- **snaps** : Ce groupe contient toutes les grandeurs à un instant  $t = n\delta t$  de la simulation. Chacun de ses sous-groupes contient les grandeurs descriptives de l'écoulement pour un instantané (snapshot). Cela inclut les champs calculés lors de la DNS, comme le champ de vitesse et de pression, ainsi que les grandeurs calculées lors du post-traitement, comme le spectre ou les différentes grandeurs statistiques.
- **stats** : Ce dernier groupe contient les résultats d'analyses statistiques effectuées sur des intervalles temporels de la simulation. Chacun de ces sous-groupes contient les grandeurs moyennées sur l'intervalle correspondant.

Par exemple, pour accéder au champ de vitesse de la 400e itération de la simulation, il convient d'utiliser le chemin `/snaps/400/u`. De même, pour accéder au spectre d'énergie moyenné sur l'intervalle d'analyse statistique  $T$ , il faudra emprunter le chemin `/stats/Gamma/E_avg`.

---

<sup>3</sup>Plus précisément, il s'agit d'attributs plutôt qu'un groupe, utilisés pour stocker des métadonnées, différentes des tableaux de données représentant les champs ou les scalaires.



**Figure A.1** : Illustration de la structure d'un fichier de stockage de données HDF5.

# Annexe B

## Méthodes Runge–Kutta

Cette annexe fournit une brève introduction aux principes de la famille des méthodes de Runge–Kutta. Pour des informations plus détaillées sur ces méthodes, on peut se référer à l’ouvrage de BUTCHER [10, section 23] et pour les méthodes spectrales en particulier, à celui de PEYRET [62, section 4.5.1(c)]. Ces méthodes sont utilisées dans le cadre de cette étude pour l’intégration temporelle des équations du mouvement fluide (VDINSE, équations (1.27) page 12).

Au début du XXe siècle, les mathématiciens allemands CARLE RUNGE et WILHELM KUTTA ont développé une méthode itérative pour résoudre les équations différentielles ordinaires. Aujourd’hui, cette méthode a été généralisée en une famille de schémas explicites et implicites connus sous le nom de méthodes de Runge–Kutta, en leur honneur. Ces méthodes sont réputées pour leur robustesse et leur stabilité, bien que cela se fasse au détriment d’un temps de calcul accru. La famille de méthodes de Runge–Kutta peut être catégorisée en deux sous-groupes : les schémas explicites et les schémas implicites. Pour illustrer le concept, le problème à valeur initiale

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = f(t, \varphi), \quad \varphi(t_0) = \varphi_0, \quad (\text{B.1})$$

est considéré.

### B.1 Méthodes explicites

Les méthodes explicites sont une extension de la méthode originale de Runge–Kutta, maintenant couramment appelée méthode de Runge–Kutta d’ordre quatre (RK4). Le schéma peut être exprimé comme suit :

$$\varphi^{n+1} = \phi + \delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad k_i = f(t^n + c_i \delta t, \varphi^n + \delta t \sum_{j=1}^{s-1} a_{ij} k_j). \quad (\text{B.2})$$

Les différentes méthodes explicites se distinguent par le nombre d’étapes  $s$ , la matrice de Runge–Kutta associées  $[a_i]$ , les coefficients de pondération  $b_i$ , et les points d’intégration  $c_j$ . Ces paramètres sont rangés dans un *tableau de Butcher* :

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ c_2 & a_{21} & & & \\ c_3 & a_{31} & a_{32} & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s-1} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_{s-1} & b_s \end{array} \quad (\text{B.3})$$

La consistance de la méthode est atteinte uniquement si la somme des poids  $\sum_{i=1}^s b_i = 1$ . En ce qui concerne l’erreur de troncature, une méthode est considérée d’ordre  $p < 5$  si  $s \leq 5$ , et pour  $p \geq 5$ , alors

$s \geq p + 1$  est requis. Déterminer le nombre minimum d'étapes nécessaires pour atteindre un certain ordre reste un problème ouvert. Néanmoins, certaines valeurs sont connues :

$$\frac{p}{\min s} \left| \begin{array}{cccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ \hline 1 & 2 & 3 & 4 & 6 & 7 & 9 & 11 \end{array} \right. \quad (\text{B.4})$$

Ces conditions spécifiques sont élaborées dans BUTCHER [10].

## B.2 Méthodes implicites

Les limitations de stabilité des méthodes explicites ont incité le développement de méthodes implicites qui offrent une région de stabilité plus étendue [62, 10]. Leur schéma s'exprime

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad k_i = f(t^n + c_i \delta t, \varphi^n + \delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j). \quad (\text{B.5})$$

La sommation sur  $j$  s'étend maintenant jusqu'à  $s$ , contrairement aux méthodes explicites. La matrice de Runge-Kutta  $[a_{ij}]$  est désormais complète, et le tableau de Butcher prend la forme suivante :

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{s,s} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \quad (\text{B.6})$$

Cette différence nécessite la résolution d'un système algébrique à chaque étape, ce qui entraîne une augmentation substantielle du coût en calcul.



## Annexe C

# Visualisations de THI à densité variable

Cette annexe contient des figures additionnelles de visualisation de l'écoulement des simulations de THI à densité variable. Ces illustrations ont été omises du corps du document par souci de concision.

### C.1 Évolution du champ de densité

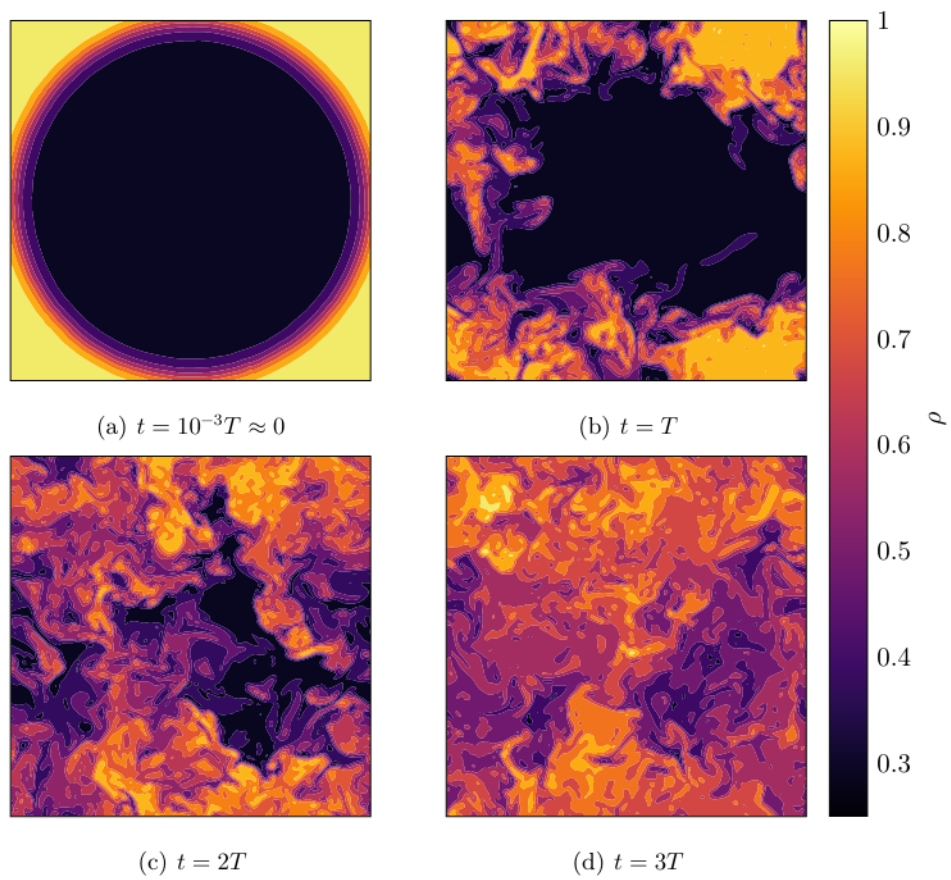
Les figures C.1 à C.4 pages 105 à 108 présentent l'évolution du champ de densité à divers instants suite à l'introduction du profil initial inhomogène dans la condition initiale pleinement turbulente lors de différentes simulations (les paramètres de simulations sont détaillés dans les légendes de chaque figure). Une observation commune à chaque figure est que, dès le premier temps de retournement ( $t \approx T$ ), la trace de la condition initiale a disparu. De plus, le processus de mélange continue à être actif pour  $t \geq 5T$ . Les illustrations pour  $s = 4$  et  $s = 0.5$  sont présentées dans le corps du document, dans les figures 3.1 et 3.2 pages 55 et 56.

### C.2 Évolution de la vorticit 

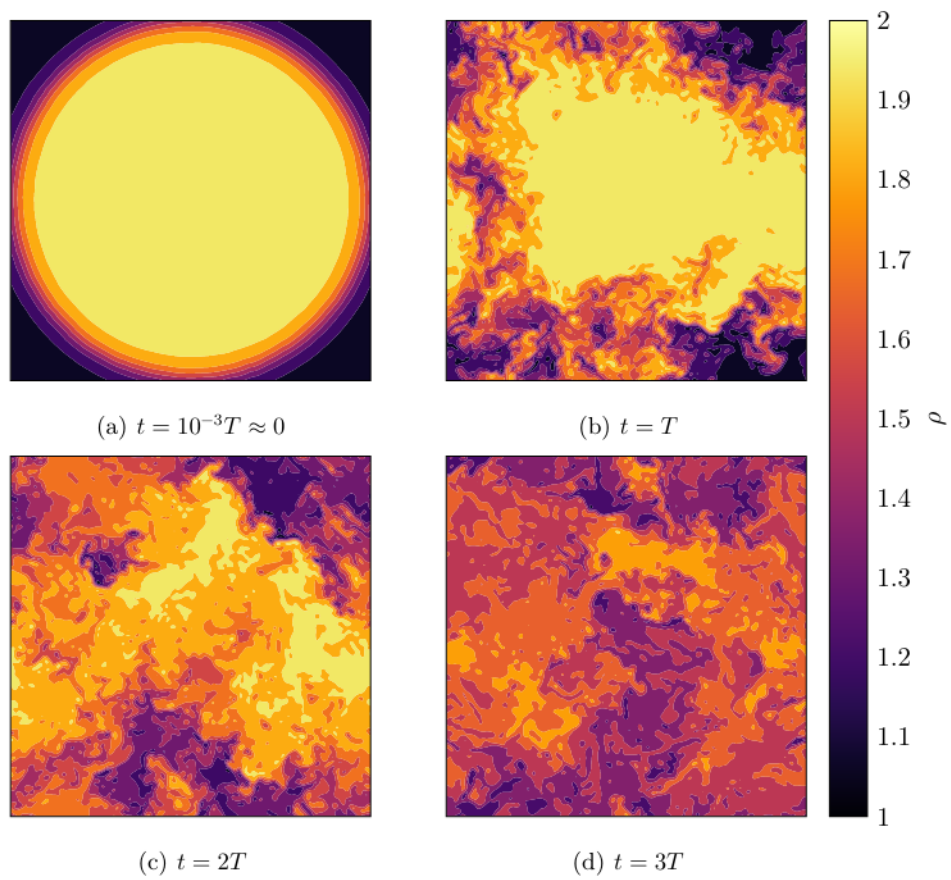
Les figures C.5 à C.9 illustrent l'évolution temporelle de la vorticit  suite à l'introduction du champ inhomog ne de densit  dans un  coulement pleinement turbulent. La visualisation de la vorticit  est obtenue par le biais de ses isosurfaces  $\|\omega\|_2$  dans la section transversale  $xz$ . Toutes les simulations ne sont pas incluses dans cette pr sentation, car la r solution des images ne permet pas de discerner des diff rentes significatives entre les divers  coulements.

L'observation principale d ductible de ces repr sentations r side dans le fait que l'introduction d'un champ de densit  non uniforme au sein d'un  coulement pleinement turbulent induit des modifications des dimensions des plus petites structures tourbillonnaires, lorsque le rapport de densit  est  $s > 1$ . En effet, une analyse des figures C.7 et C.9 r v le que les  coulements    $s = 4$  et  $s = 8$  g n rent, lors du processus de m lange, des structures coh rentes de taille inf rieure   celles pr sentes dans la condition initiale. En outre, les  coulements    $s = \frac{1}{4}$  et  $s = \frac{1}{2}$ , illustr s dans les figures C.5 et C.6, exhibent des structures de dimension comparable   celles de la condition initiale.

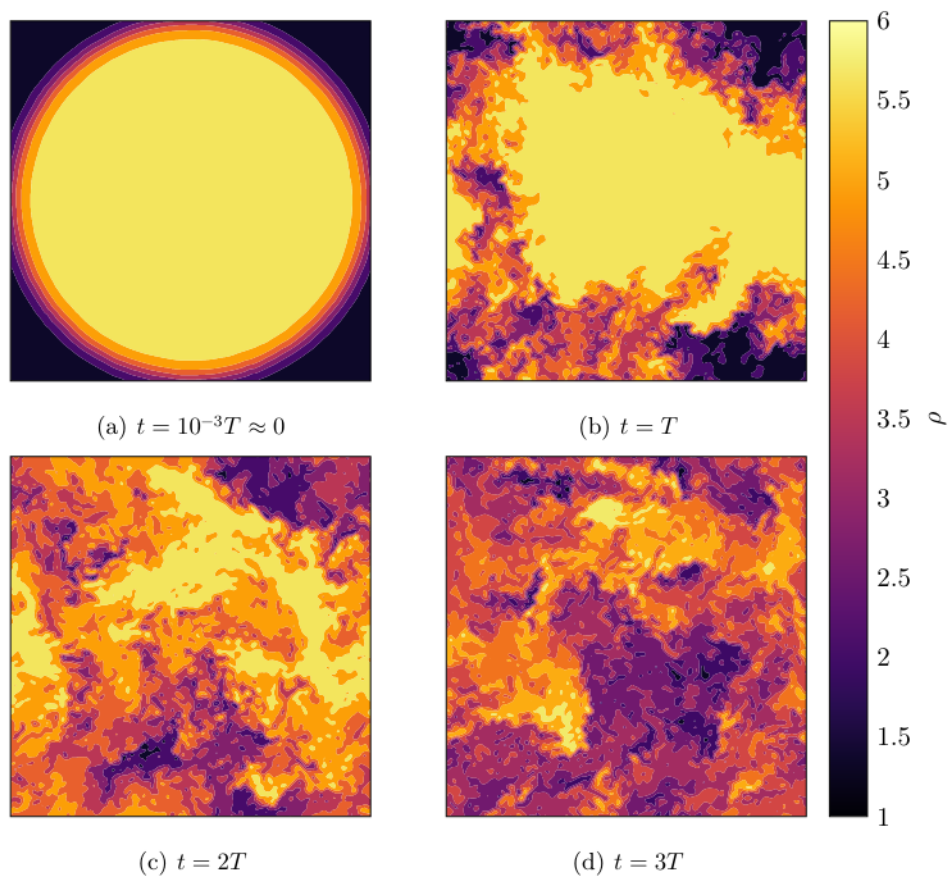
Dans le corps du document, les figures 3.16 et 3.17 pages 73 et 74 pr sentent une visualisation des isosurfaces de vorticit , dans laquelle un filtre est appliqu  pour mettre en  vidence les structures des plus intenses.



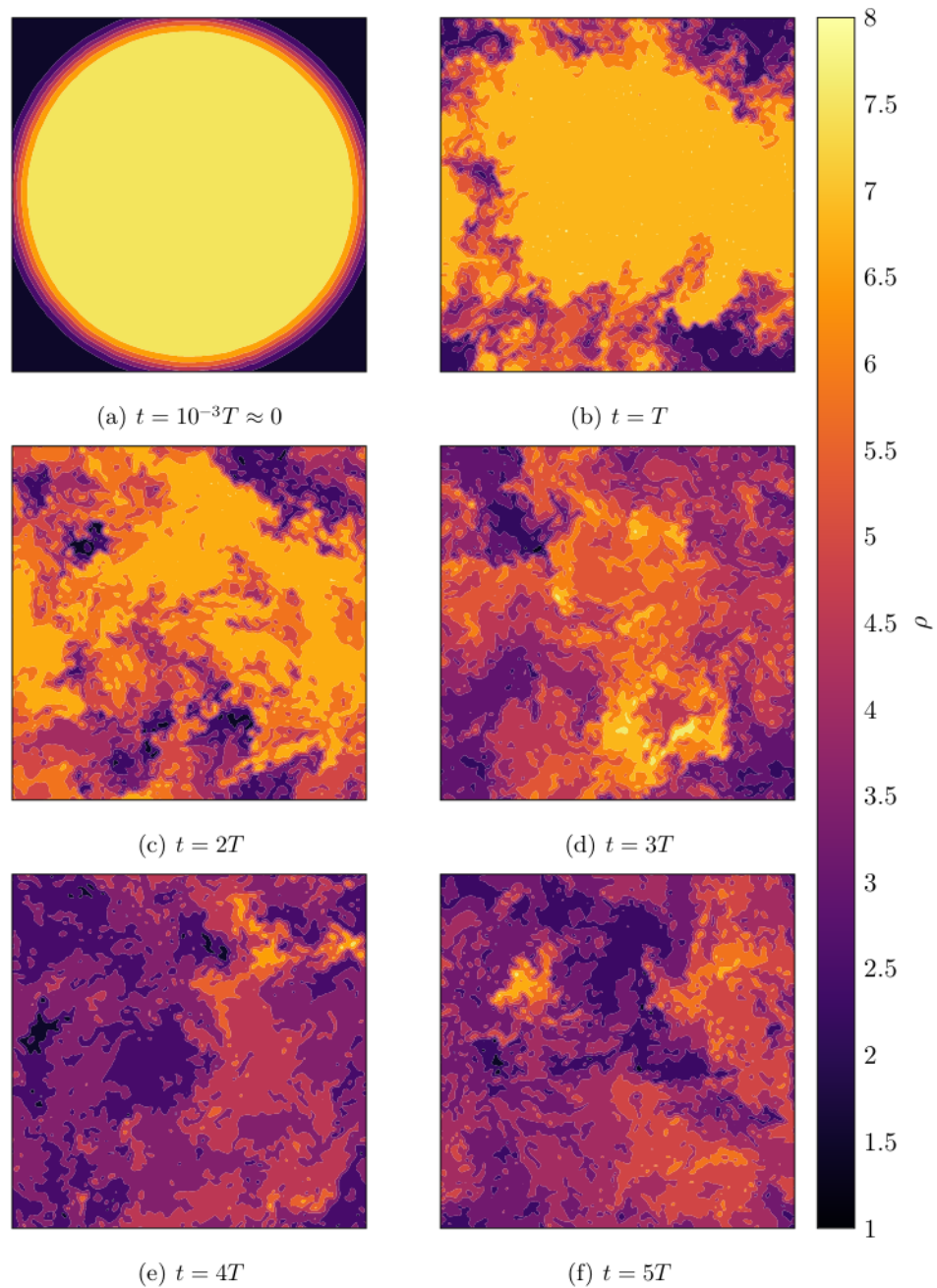
**Figure C.1** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.25.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



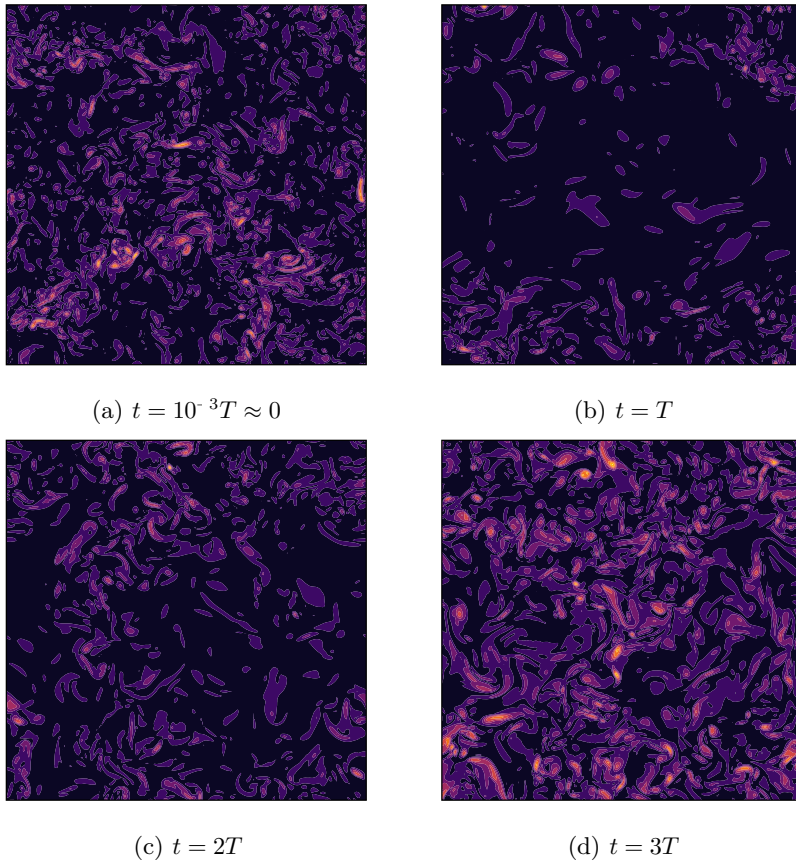
**Figure C.2** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-2.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure C.3** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-6.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

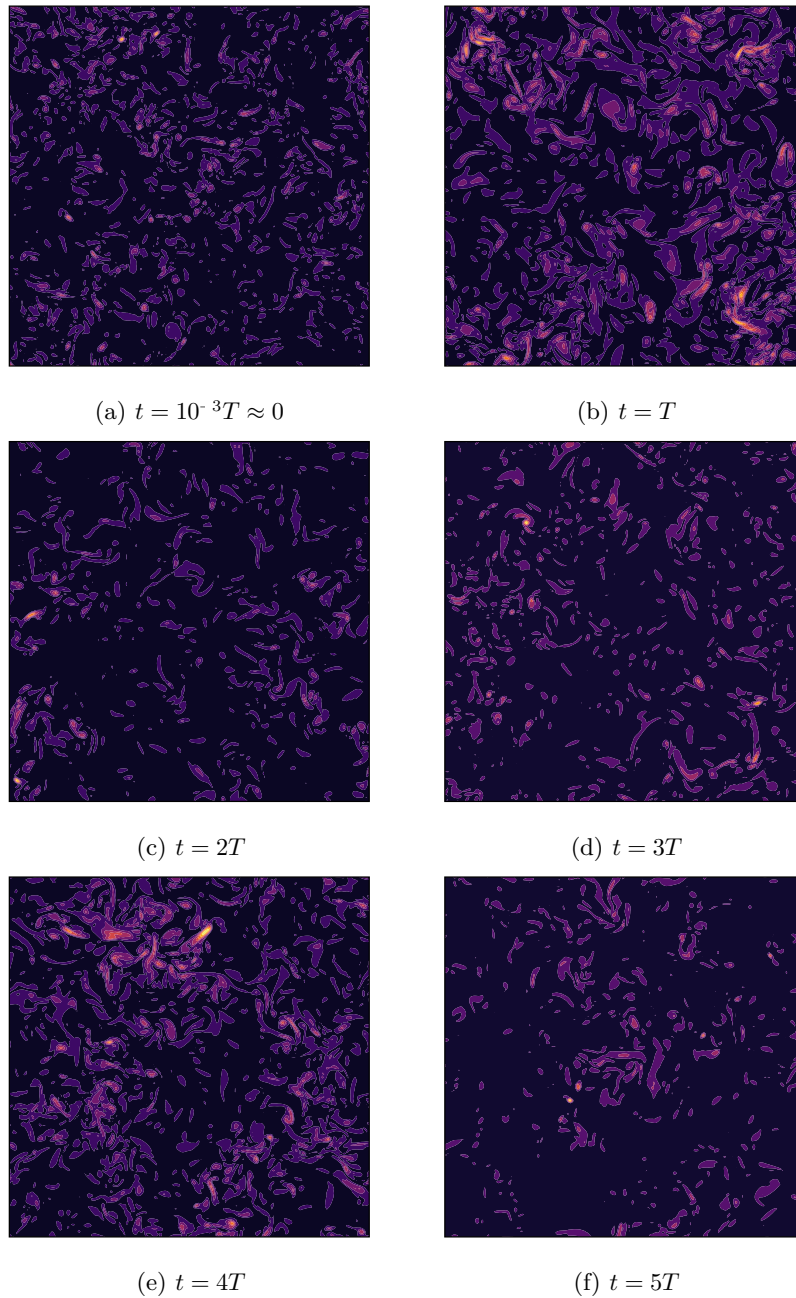


**Figure C.4** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-8.  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

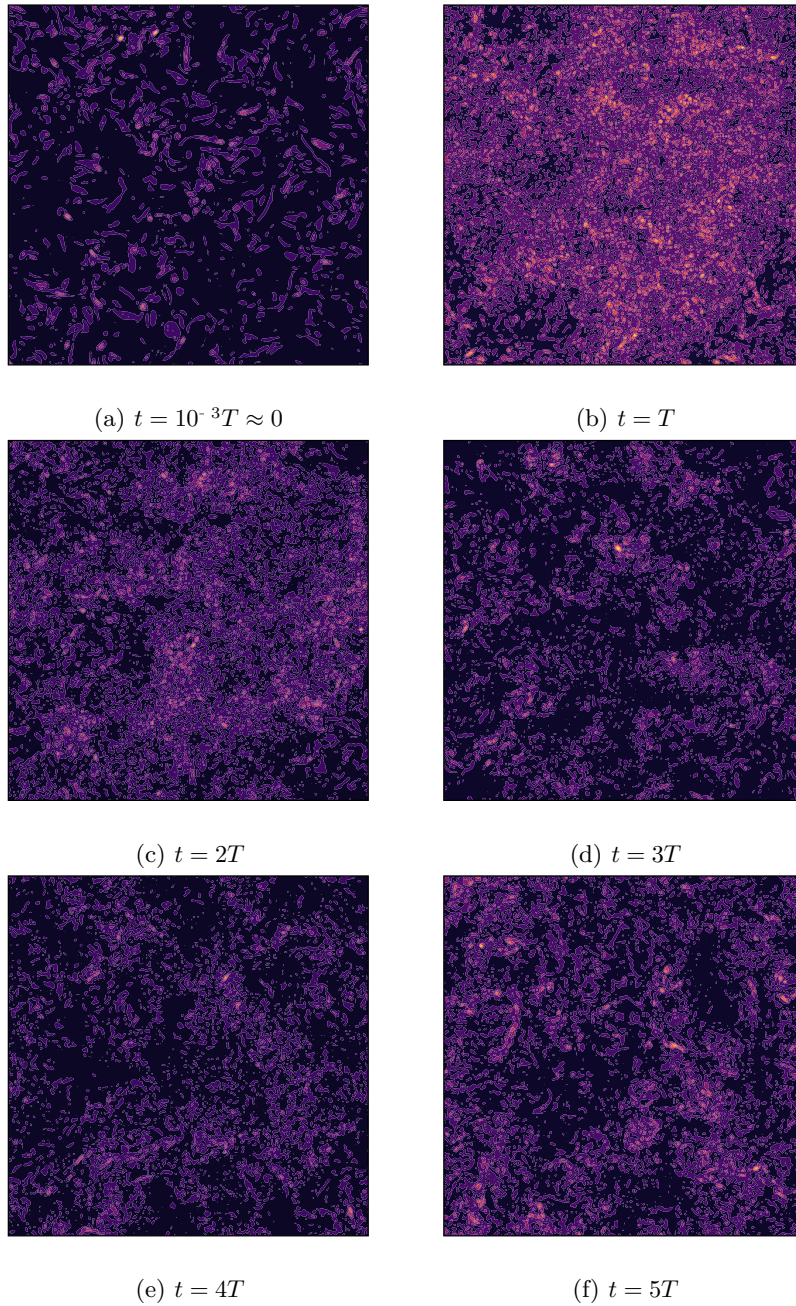


**Figure C.5** : Évolution du champ de vorticit  lors de la DNS de THI   densit  variable 256-0.25. La vorticit  est repr sent e par les isosurfaces de sa norme  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$ .  $T \approx 2$  repr sente le temps de retournement d fini dans l' quation (1.48) page 20. Les param tres des diff rentes simulations de THI sont r pertori s dans le tableau 3.1 page 49.



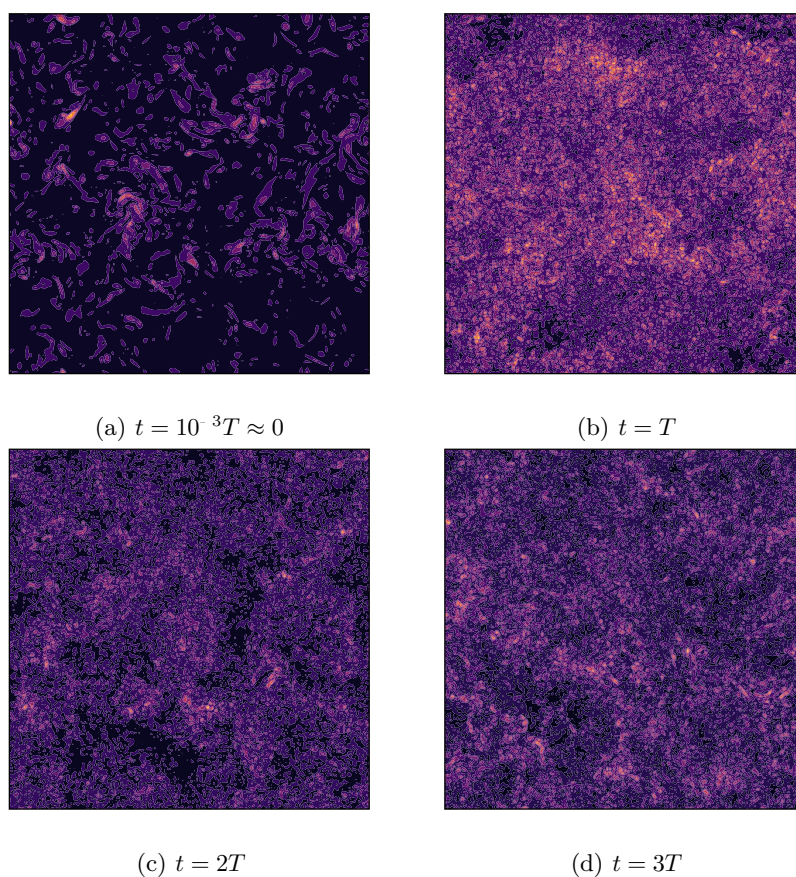


**Figure C.6** : Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-0.5. La vorticité est représentée par les isosurfaces de sa norme  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$ .  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.

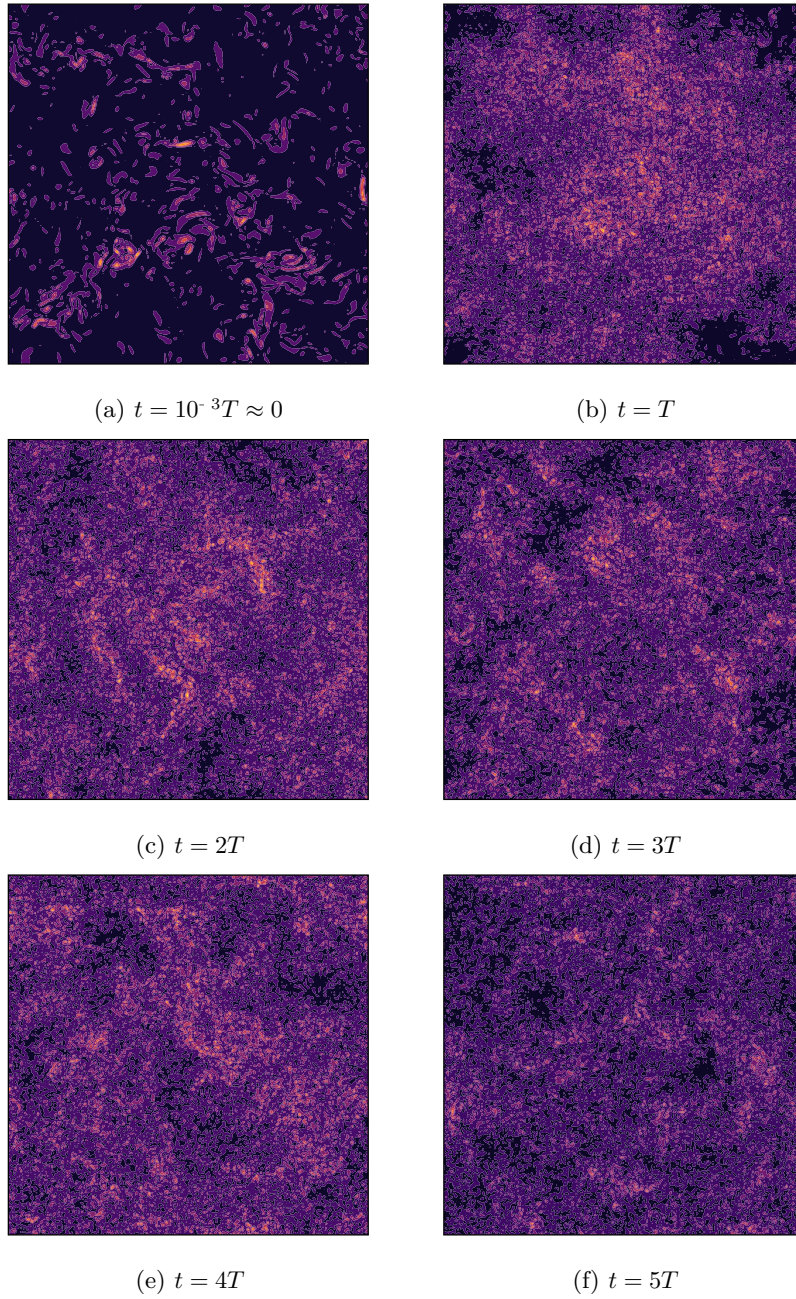


**Figure C.7** : Évolution du champ de densité lors de la DNS de THI à densité variable 256-4. La vorticité est représentée par les isosurfaces de sa norme  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$ .  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.





**Figure C.8 :** Évolution du champ de vorticité lors de la DNS de THI à densité variable 256-6. La vorticité est représentée par les isosurfaces de sa norme  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$ .  $T \approx 2$  représente le temps de retournement défini dans l'équation (1.48) page 20. Les paramètres des différentes simulations de THI sont répertoriés dans le tableau 3.1 page 49.



**Figure C.9** : Évolution du champ de vorticit  lors de la DNS de THI   densit  variable 256-8. La vorticit  est repr sent e par les isosurfaces de sa norme  $\|\boldsymbol{\omega}\|_2$  dans la section transversale  $xz$ .  $T \approx 2$  repr sente le temps de retournement d fini dans l' quation (1.48) page 20. Les param tres des diff rentes simulations de THI sont r pertori s dans le tableau 3.1 page 49.

## Annexe D

# Calcul du degré d'isotropie

La modélisation THI exige une condition d'isotropie statistique au sein de l'écoulement considéré. Cela implique que les propriétés statistiques des fluctuations turbulentes démontrent une uniformité dans toutes les directions spatiales. Afin de valider cette exigence au sein des simulations numériques, le degré d'isotropie est calculé après chaque intégration temporelle, de façon à mesurer l'isotropie du champ de vitesse. Cette mesure est notamment tracée dans la figure 3.3 page 57 pour la simulation 256-4. Cette mesure trouve son inspiration dans la méthodologie introduite par CURRY et al. [18] dans ces travaux sur la turbulence isotrope.

Cette approche implique la construction d'une base vectorielle composée d'un vecteur unitaire  $\mathbf{e}_z$  des coordonnées cartésiennes de l'espace physique, ainsi que deux vecteurs directeurs spectraux

$$\mathbf{e}_1(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{e}_z \times \mathbf{k}}{\|\mathbf{e}_z \times \mathbf{k}\|}, \quad \mathbf{e}_2(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{e}_2 \times \mathbf{k}}{\|\mathbf{e}_2 \times \mathbf{k}\|}.$$

En l'absence d'effets porteurs le long de la direction  $\mathbf{e}_z$ , les effets non linéaires ainsi que le mélange conduisent à une répartition égale de l'énergie de  $\hat{\mathbf{u}}(k)$  le long des axes  $\mathbf{e}_1(k)$  et  $\mathbf{e}_2(k)$  [18]. Une mesure de l'isotropie est donc donnée en comparant les contributions  $\psi_1$  et  $\psi_2$  de l'énergie cinétique par unité de masse dans l'espace spectral

$$\psi_1 = \langle \|\mathbf{e}_1 \cdot \hat{\mathbf{u}}(k)\|^2 \rangle, \quad \psi_2 = \langle \|\mathbf{e}_2 \cdot \hat{\mathbf{u}}(k)\|^2 \rangle$$

où les crochets angulaires  $\langle \cdot \rangle$  représentent une moyenne sur l'ensemble du volume périodique, ou en d'autres termes, une sommation sur l'ensemble des nombres d'onde disponibles. Pour un écoulement pleinement isotrope,  $\psi_1 = \psi_2$  ainsi, une mesure approximative de l'écart par rapport à l'isotropie est donnée par

$$I^2 = \psi_1 / \psi_2.$$

Un écoulement est donc considéré comme étant proche d'un état pleinement isotrope pour  $0.95 \leq I \leq 1.05$ .

Il est crucial de noter que lorsqu'une méthode de forçage non isotrope est mise en œuvre pour maintenir la THI, les modes associés à l'injection d'énergie ne doivent pas être pris en compte dans la mesure de l'isotropie. Dans cette étude, les simulations sont initialisées de manière similaire à la méthode de KERR [49], qui excite les premiers modes dans chaque direction (voir équations équation (3.5)). Cette condition initiale n'est pas isotrope. Afin d'éliminer une signature dans la mesure de l'isotropie, les premiers et derniers modes de chaque direction ne sont pas comptabilisés. L'exclusion de ces modes n'entraîne pas de problème en ce qui concerne la contrainte de modélisation THI, car cette dernière exige une isotropie des fluctuations. Les premiers modes sont associés aux grandes structures de l'écoulement, tandis que les fluctuations des autres échelles sont indépendantes du comportement des grands tourbillons, conformément à la théorie de KOLMOGOROV [50].

# Bibliographie

- [1] Ann S. ALMGREN et al. « A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier–Stokes Equations ». In : *Journal of Computational Physics* 142.1 (mai 1998), p. 1-46. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1006/jcph.1998.5890. URL : <https://doi.org/10.1006/jcph.1998.5890>.
- [2] Stanislav Nikolaevich ANTONTSEV, Aleksandr Vasil'evich KAZHIKTOV et Valetin Nikolaevich MONAKHOV. *Boundary Value Problems in Mechanics of Nonhomogeneous Fluids*. North Holland Amsterdam : Elsevier, 1990. ISBN : 9780444883827. DOI : 10.1016/s0168-2024(08)x7006-7. URL : [https://doi.org/10.1016/s0168-2024\(08\)x7006-7](https://doi.org/10.1016/s0168-2024(08)x7006-7).
- [3] Samir K ASHOUR et Mahmood A ABDEL-HAMEED. « Approximate skew normal distribution ». In : *Journal of Advanced Research* 1.4 (2010), p. 341-350.
- [4] H BEIRÃO DA VEIGA. « Long time behaviour of the solutions to the Navier-Stokes equations with diffusion ». In : *Nonlinear Analysis : Theory, Methods & Applications* 27.11 (déc. 1996), p. 1229-1239. DOI : 10.1016/0362-546x(95)00117-e. URL : <https://doi.org/10.1016%2F0362-546x%2895%2900117-e>.
- [5] John B. BELL et Daniel L. MARCUS. « A second-order projection method for variable-density flows ». In : *Journal of Computational Physics* 101.2 (août 1992), p. 334-348. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/0021-9991(92)90011-m. URL : [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90011-m](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90011-m).
- [6] R. Byron BIRD, Warren E. STEWARD et N. Edwin LIGHTFOOT. *Transport phenomena*. 2nd, Wiley international ed. Wiley, 2002. ISBN : 9780471410775,0471410772.
- [7] Sami BOUJEMAA, Muriel AMIELH et Marie Pierre CHAUVE. « Analyse spatio-temporelle de jets axisymétriques d'air et d'hélium ». In : *Comptes Rendus Mécanique* 332.11 (nov. 2004), p. 933-939. DOI : 10.1016/j.crme.2004.06.009. URL : <https://doi.org/10.1016%2Fj.crme.2004.06.009>.
- [8] Didier BRESCH, El Hassan ESSOUFI et Mamadou SY. « De nouveaux systèmes de type Kazhikhov–Smagulov : modèles de propagation de polluants et de combustion à faible nombre de Mach ». In : *Comptes Rendus Mathématique* 335.11 (déc. 2002), p. 973-978. DOI : 10.1016/s1631-073x(02)02593-1. URL : <https://doi.org/10.1016%2Fs1631-073x%2802%2902593-1>.
- [9] David L. BROWN, Ricardo CORTEZ et Michael L. MINION. « Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier–Stokes Equations ». In : *Journal of Computational Physics* 168.2 (avr. 2001), p. 464-499. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1006/jcph.2001.6715. URL : <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6715>.
- [10] John C. BUTCHER. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. Wiley, mai 2003. DOI : 10.1002/0470868279. URL : <https://doi.org/10.1002%2F0470868279>.
- [11] Caterina CALGARO, Emmanuel CREUSÉ et Thierry GOUDON. « An hybrid finite volume–finite element method for variable density incompressible flows ». In : *Journal of Computational Physics* 227.9 (avr. 2008), p. 4671-4696. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.01.017. URL : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.01.017>.

- [12] Claudio CANUTO et Alfio QUARTERONI. « Preconditioned minimal residual methods for Chebyshev spectral calculations ». In : *Journal of Computational Physics* 60.2 (sept. 1985), p. 315-337. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/0021-9991(85)90010-5. URL : [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(85\)90010-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(85)90010-5).
- [13] Claudio CANUTO et al. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 1988. ISBN : 978-3-540-52205-8,978-3-642-84108-8. DOI : 10.1007/978-3-642-84108-8. URL : <https://doi.org/10.1007/978-3-642-84108-8>.
- [14] Phares L. CARROLL et G. BLANQUART. « A proposed modification to Lundgren's physical space velocity forcing method for isotropic turbulence ». In : *Physics of Fluids* 25.10 (oct. 2013), p. 105114. ISSN : 1070-6631, 1089-7666. DOI : 10.1063/1.4826315. URL : <https://doi.org/10.1063/1.4826315>.
- [15] Jean-Bernard CAZALBOU et Jérôme FONTANE. *Physique de la turbulence*. ISAE-SUPAERO Engineering Formation. 2021.
- [16] Paul CONCUS et Gene H. GOLUB. « Use of Fast Direct Methods for the Efficient Numerical Solution of Nonseparable Elliptic Equations ». In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 10.6 (déc. 1973), p. 1103-1120. DOI : 10.1137/0710092. URL : <https://doi.org/10.1137/0710092>.
- [17] James W. COOLEY et John W. TUKEY. « An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series ». In : *Mathematics of Computation* 19.90 (1965), p. 297-301. DOI : 10.1090/s0025-5718-1965-0178586-1. URL : <https://doi.org/10.1090/s0025-5718-1965-0178586-1>.
- [18] James H. CURRY et al. « Order and disorder in two- and three-dimensional Bénard convection ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 147 (oct. 1984), p. 1-38. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112084001968. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112084001968>.
- [19] Edward Lansing CUSSLER. *Diffusion : mass transfer in fluid systems*. Cambridge university press, 2009. ISBN : 9780521871211,0521871212.
- [20] Bastien DI PIERRO. « Étude de l'évolution spatio-temporelle d'un jet tournant tridimensionnel à masse volumique variable ». Thèse de doctorat dirigée par Abid, Malek et Amielh, Muriel. Thèse de doct. Université d'Aix-Marseille, 2012. URL : <http://www.theses.fr/2012AIXM4749>.
- [21] Bastien DI PIERRO et Malek ABID. « A projection method for the spectral solution of non-homogeneous and incompressible Navier-Stokes equations ». In : *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 71.8 (juin 2012), p. 1029-1054. ISSN : 0271-2091. DOI : 10.1002/flid.3700. URL : <https://doi.org/10.1002/flid.3700>.
- [22] Bastien DI PIERRO et Malek ABID. « Energy spectra in a helical vortex breakdown ». In : *Physics of Fluids* 23.2 (fév. 2011), p. 025104. ISSN : 1070-6631, 1089-7666. DOI : 10.1063/1.3553466. URL : <https://doi.org/10.1063/1.3553466>.
- [23] Bastien DI PIERRO et Malek ABID. « Rayleigh-Taylor instability in variable density swirling flows ». In : *The European Physical Journal B* 85.2 (fév. 2012). ISSN : 1434-6028, 1434-6036. DOI : 10.1140/epjb/e2012-20540-6. URL : <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-20540-6>.
- [24] Bérengère DUBRULLE. « Beyond Kolmogorov cascades ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 867 (avr. 2019), p. 1. DOI : 10.1017/jfm.2019.98. URL : <https://doi.org/10.1017/jfm.2019.98>.
- [25] Vinayak ESWARAN et Stephen B. POPE. « An examination of forcing in direct numerical simulations of turbulence ». In : *Computers & Fluids* 16.3 (jan. 1988), p. 257-278. ISSN : 0045-7930. DOI : 10.1016/0045-7930(88)90013-8. URL : [https://doi.org/10.1016/0045-7930\(88\)90013-8](https://doi.org/10.1016/0045-7930(88)90013-8).
- [26] Jérôme FONTANE. « Transition des écoulements cisailés libres à densité variable ». Thèse de doct. Institut National Polytechnique de Toulouse, nov. 2005. URL : <https://oatao.univ-toulouse.fr/7338/>.
- [27] Franca FRANCHI et Brian STRAUGHAN. « A comparison of the Graffi and Kazhikhov-Smagulov models for top heavy pollution instability ». In : *Advances in Water Resources* 24.6 (juin 2001), p. 585-594. DOI : 10.1016/s0309-1708(00)00073-7. URL : [https://doi.org/10.1016/s0309-1708\(00\)00073-7](https://doi.org/10.1016/s0309-1708(00)00073-7).

- [28] David Albertovich FRANK-KAMENETSKII. *Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics*. T. 2171. Princeton University Press, déc. 1955. ISBN : 9781400877195. DOI : 10.1515/9781400877195. URL : <https://doi.org/10.1515/9781400877195>.
- [29] Matteo. FRIGO et Steven G. JOHNSON. « The Design and Implementation of FFTW3 ». In : *Proceedings of the IEEE* 93.2 (fév. 2005), p. 216-231. DOI : 10.1109/jproc.2004.840301. URL : <https://doi.org/10.1109/jproc.2004.840301>.
- [30] François GALLAIRE et Jean-Marc CHOMAZ. « Mode selection in swirling jet experiments : a linear stability analysis ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 494 (nov. 2003), p. 223-253. DOI : 10.1017/s0022112003006104. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112003006104>.
- [31] Lori S. GLAZE et Stephen M. BALOGA. « Sensitivity of buoyant plume heights to ambient atmospheric conditions : Implications for volcanic eruption columns ». In : *Journal of Geophysical Research : Atmospheres* 101.D1 (jan. 1996), p. 1529-1540. DOI : 10.1029/95jd03071. URL : <https://doi.org/10.1029/95jd03071>.
- [32] Toshiyuki GOTOH, Daigen FUKAYAMA et Tohru NAKANO. « Velocity field statistics in homogeneous steady turbulence obtained using a high-resolution direct numerical simulation ». In : *Physics of Fluids* 14.3 (mars 2002), p. 1065-1081. DOI : 10.1063/1.1448296. URL : <https://doi.org/10.1063/1.1448296>.
- [33] Sigal GOTTLIEB, Chi-Wang SHU et Eitan TADMOR. « Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods ». In : *SIAM Review* 43.1 (jan. 2001), p. 89-112. DOI : 10.1137/s003614450036757x. URL : <https://doi.org/10.1137/s003614450036757x>.
- [34] The HDF GROUP. *Hierarchical Data Format, version 5*. 1997-2023. URL : <https://www.hdfgroup.org/HDF5>.
- [35] Carlo GUALTIERI et al. « On the Values for the Turbulent Schmidt Number in Environmental Flows ». In : *Fluids* 2.2 (avr. 2017), p. 17. ISSN : 2311-5521. DOI : 10.3390/fluids2020017. URL : <https://doi.org/10.3390/fluids2020017>.
- [36] Jean-Luc GUERMOND et Abner SALGADO. « A splitting method for incompressible flows with variable density based on a pressure Poisson equation ». In : *Journal of Computational Physics* 228.8 (mai 2009), p. 2834-2846. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2008.12.036. URL : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.12.036>.
- [37] Francisco GUILLÉN-GONZÁLEZ, Pedro Danizete DAMÁZIO et Marko A. ROJAS-MEDAR. « Approximation by an iterative method for regular solutions for incompressible fluids with mass diffusion ». In : *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 326.1 (fév. 2007), p. 468-487. DOI : 10.1016/j.jmaa.2006.03.009. URL : <https://doi.org/10.1016/j.jmaa.2006.03.009>.
- [38] Armann GYLFASSON, Sathyanarayana AYYALASOMAYAJULA et Zellman WARHAFT. « Intermittency, pressure and acceleration statistics from hot-wire measurements in wind-tunnel turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 501 (fév. 2004), p. 213-229. DOI : 10.1017/s002211200300747x. URL : <https://doi.org/10.1017/s002211200300747x>.
- [39] Charles R. HARRIS et al. « Array programming with NumPy ». In : *Nature* 585.7825 (sept. 2020), p. 357-362. DOI : 10.1038/s41586-020-2649-2. URL : <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>.
- [40] Thomas J. R. HUGHES et Assad A. OBERAI. « Calculation of shear stresses in the Fourier-Galerkin formulation of turbulent channel flows : projection, the Dirichlet filter and conservation ». In : *Journal of Computational Physics* 188.1 (mai 2003), p. 281-295. DOI : 10.1016/s0021-9991(03)00167-0. URL : [https://doi.org/10.1016/s0021-9991\(03\)00167-0](https://doi.org/10.1016/s0021-9991(03)00167-0).
- [41] Takashi ISHIHARA et al. « Small-scale statistics in high-resolution direct numerical simulation of turbulence : Reynolds number dependence of one-point velocity gradient statistics ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 592 (nov. 2007), p. 335-366. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112007008531. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112007008531>.



- [42] Corentin JACQUES. « Stabilité des écoulements parallèles incompressibles à grande variation de masse volumique ». Thèse de doct. Université Claude Bernard Lyon1, 2023.
- [43] Corentin JACQUES, Bastien DI PIERRO et Marc BUFFAT. « The stability of variable density mixing layers and planar jets ». In : *Journal of Fluid Mechanics* (soumis).
- [44] Jérémie JANIN et al. « A new linear forcing method for isotropic turbulence with controlled integral length scale ». In : *Physics of Fluids* 33.4 (avr. 2021), p. 045127. ISSN : 1070-6631, 1089-7666. DOI : 10.1063/5.0045818. URL : <https://doi.org/10.1063/5.0045818>.
- [45] Javier JIMÉNEZ. « Intermittency in turbulence ». In : *Proc. 15th "Aha Huliko" a Winter Workshop, Extreme Events*. 2007, p. 81-90.
- [46] Javier JIMÉNEZ et al. « The structure of intense vorticity in isotropic turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 255 (oct. 1993), p. 65. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112093002393. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112093002393>.
- [47] S. Malik KARIM et Louis ROSENHEAD. « The Second Coefficient of Viscosity of Liquids and Gases ». In : *Rev. Mod. Phys.* 24 (2 avr. 4), p. 108-116. DOI : 10.1103/RevModPhys.24.108. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.24.108>.
- [48] Aleksandr Vasil'evich KAZHIKHOV et Shaltay S. SMAGULOV. « The correctness of boundary-value problems in a diffusion model of an inhomogeneous liquid ». In : *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 234.2 (1977), p. 330-332.
- [49] Robert McDougall KERR. « Higher-order derivative correlations and the alignment of small-scale structures in isotropic numerical turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 153 (avr. 1985), p. 31. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112085001136. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112085001136>.
- [50] Andrey Nikolaevich KOLMOGOROV. « The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences* 434.1890 (juill. 1991), p. 9-13. ISSN : 0962-8444, 2053-9177. DOI : 10.1098/rspa.1991.0075. URL : <https://doi.org/10.1098/rspa.1991.0075>.
- [51] Daniel LIVESCU et J. Raymond RISTORCELLI. « Buoyancy-driven variable-density turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 591 (oct. 2007), p. 43-71. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112007008270. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112007008270>.
- [52] Daniel LIVESCU et J. Raymond RISTORCELLI. « Variable-density mixing in buoyancy-driven turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 605 (mai 2008), p. 145-180. DOI : 10.1017/s0022112008001481. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112008001481>.
- [53] Daniel LIVESCU et al. « New phenomena in variable-density Rayleigh–Taylor turbulence ». In : *Physica Scripta* T142 (déc. 2010), p. 014015. DOI : 10.1088/0031-8949/2010/t142/014015. URL : <https://doi.org/10.1088/0031-8949/2010/t142/014015>.
- [54] Adriana LOPEZ-ZAZUETA. « Stabilité des écoulements parallèles incompressibles à grande variation de masse volumique ». Thèse de doct. Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace, 2015.
- [55] Thomas S. LUNDGREN. « Linearly Forced Isotropic Turbulence ». In : *Annual Research Briefs*. Center for Turbulence Research, Stanford. Fév. 2003, p. 461-473. URL : <https://web.stanford.edu/group/ctr/ResBriefs03/lundgren.pdf>.
- [56] Mohammad MOHAGHAR et al. « Evaluation of turbulent mixing transition in a shock-driven variable-density flow ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 831 (oct. 2017), p. 779-825. DOI : 10.1017/jfm.2017.664. URL : <https://doi.org/10.1017/jfm.2017.664>.
- [57] Yohei MORINISHI, Shinji TAMANO et Koichi NAKABAYASHI. « Direct numerical simulation of compressible turbulent channel flow between adiabatic and isothermal walls ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 502 (avr. 2004), p. 273-308. DOI : 10.1017/s0022112003007705. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112003007705>.

- [58] Keiko K. NOMURA et Said. E. ELGHOBASHI. « The structure of inhomogeneous turbulence in variable density nonpremixed flames ». In : *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 5-5.4-5 (nov. 1993), p. 153-175. DOI : 10.1007/bf00271656. URL : <https://doi.org/10.1007/2Fbf00271656>.
- [59] Steven A. ORSZAG. « On the Elimination of Aliasing in Finite-Difference Schemes by Filtering High-Wavenumber Components ». In : *Journal of the Atmospheric Sciences* 28.6 (sept. 1971), p. 1074-1074. DOI : 10.1175/1520-0469(1971)028<1074:oteoai>2.0.co;2. URL : <https://doi.org/10.1175/2F1520-0469%281971%29028%3C1074%3Aoteoai%3E2.0.co%3B2>.
- [60] Matthew R. OVERHOLT et Stephen B. POPE. « A deterministic forcing scheme for direct numerical simulations of turbulence ». In : *Computers & Fluids* 27.1 (jan. 1998), p. 11-28. ISSN : 0045-7930. DOI : 10.1016/s0045-7930(97)00019-4. URL : [https://doi.org/10.1016/s0045-7930\(97\)00019-4](https://doi.org/10.1016/s0045-7930(97)00019-4).
- [61] Rajendra K PACHAURI et al. *Climate change 2014 : synthesis report. Contribution of Working Groups I, II and III to the fifth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Ipcc, 2014. ISBN : 978-92-9169-143-2. URL : [https://epic.awi.de/id/eprint/37530/1/IPCC\\_AR5\\_SYR\\_Final.pdf](https://epic.awi.de/id/eprint/37530/1/IPCC_AR5_SYR_Final.pdf).
- [62] Roger PEYRET. *Spectral Methods for Incompressible Viscous Flow*. Applied mathematical sciences 148. New York : Springer New York, 2002. ISBN : 9781441929136, 9781475765571. DOI : 10.1007/978-1-4757-6557-1. URL : <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-6557-1>.
- [63] Stephen B. POPE. *Turbulent flows*. Cambridge New York : Cambridge University Press, 2000. ISBN : 9780521598866. DOI : <https://doi.org/10.1017/CB09780511840531>.
- [64] Zecong QIN, Le FANG et Jian FANG. « How isotropic are turbulent flows generated by using periodic conditions in a cube? » In : *Physics Letters A* 380.13 (mars 2016), p. 1310-1317. ISSN : 0375-9601. DOI : 10.1016/j.physleta.2016.02.001. URL : <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.02.001>.
- [65] Pooja RAO, Colm-Cille Patrick CAULFIELD et John David GIBBON. « Nonlinear effects in buoyancy-driven variable-density turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 810 (nov. 2017), p. 362-377. DOI : 10.1017/jfm.2016.719. URL : <https://doi.org/10.1017/2Fjfm.2016.719>.
- [66] Stéphane RAVIER et al. « Direct numerical simulations of variable-density plane jets ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 546 (déc. 2005), p. 153. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112005006993. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112005006993>.
- [67] Loïc REYNIER et al. « A preconditioning for the spectral solution of incompressible variable-density flows ». In : *Computers & Fluids* 266 (nov. 2023), p. 106024. ISSN : 0045-7930. DOI : 10.1016/j.compfluid.2023.106024. URL : <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2023.106024>.
- [68] Osborne REYNOLDS. « IV. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)* 186 (déc. 1895), p. 123-164. ISSN : 0264-3820, 2053-9231. DOI : 10.1098/rsta.1895.0004. URL : <https://doi.org/10.1098/rsta.1895.0004>.
- [69] Carlos ROSALES et Charles MENEVEAU. « Linear forcing in numerical simulations of isotropic turbulence : Physical space implementations and convergence properties ». In : *Physics of Fluids* 17.9 (sept. 2005), p. 095106. ISSN : 1070-6631, 1089-7666. DOI : 10.1063/1.2047568. URL : <https://doi.org/10.1063/1.2047568>.
- [70] Youcef SAAD et Martin H. SCHULTZ. « GMRES : A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems ». In : *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7.3 (juill. 1986), p. 856-869. ISSN : 0196-5204, 2168-3417. DOI : 10.1137/0907058. URL : <https://doi.org/10.1137/0907058>.
- [71] Pierre SAGAUT et Claude CAMBON. *Homogeneous turbulence dynamics*. 2<sup>e</sup> éd. Springer, 2018. ISBN : 978-3-319-73161-2. DOI : 10.1007/978-3-319-73162-9.



- [72] Matthew M. SCASE et Richard J. A. HILL. « Centrifugally forced Rayleigh–Taylor instability ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 852 (août 2018), p. 543-577. DOI : 10.1017/jfm.2018.539. URL : <https://doi.org/10.1017%2Fjfm.2018.539>.
- [73] Philipp SCHLATTER, Nilolaus A. ADAMS et Leonhard KLEISER. « A windowing method for periodic inflow/outflow boundary treatment of non-periodic flows ». In : *Journal of Computational Physics* 206.2 (juill. 2005), p. 505-535. ISSN : 0021-9991. DOI : 10.1016/j.jcp.2004.12.015. URL : <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.12.015>.
- [74] Eric D. SIGGIA et G. S. PATTERSON. « Intermittency effects in a numerical simulation of stationary three-dimensional turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 86.3 (mai 1978), p. 567-592. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112078001287. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112078001287>.
- [75] Katepalli Raju SREENIVASAN et Robert A. ANTONIA. « The phenomenology of small-scale turbulence ». In : *Annual Review of Fluid Mechanics* 29.1 (jan. 1997), p. 435-472. DOI : 10.1146/annurev.fluid.29.1.435. URL : <https://doi.org/10.1146%2Fannurev.fluid.29.1.435>.
- [76] William SUTHERLAND. « LII. The viscosity of gases and molecular force ». In : *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 36.223 (1893), p. 507-531. DOI : 10.1080/14786449308620508. URL : <https://doi.org/10.1080/14786449308620508>.
- [77] Ross TAYLOR et Rajamani KRISHNA. *Multicomponent mass transfer*. T. 2. Wiley, 1993.
- [78] Yifeng TIAN, Farhad A. JABERI et Daniel LIVESCU. « Density effects on post-shock turbulence structure and dynamics ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 880 (oct. 2019), p. 935-968. DOI : 10.1017/jfm.2019.707. URL : <https://doi.org/10.1017%2Fjfm.2019.707>.
- [79] Albert VINCENT et Maria MENEGUZZI. « The spatial structure and statistical properties of homogeneous turbulence ». In : *Journal of Fluid Mechanics* 225 (avr. 1991), p. 1-20. ISSN : 0022-1120, 1469-7645. DOI : 10.1017/s0022112091001957. URL : <https://doi.org/10.1017/s0022112091001957>.
- [80] Charles R. WILKE. « A Viscosity Equation for Gas Mixtures ». In : *The Journal of Chemical Physics* 18.4 (avr. 1950), p. 517-519. DOI : 10.1063/1.1747673. URL : <https://doi.org/10.1063%2F1.1747673>.
- [81] Mitsuo YOKOKAWA et al. « 16.4-Tflops Direct Numerical Simulation of Turbulence by a Fourier Spectral Method on the Earth Simulator ». In : *ACM/IEEE SC 2002 Conference (SC 02)*. IEEE, 2002. DOI : 10.1109/sc.2002.10052. URL : <https://doi.org/10.1109%2Fsc.2002.10052>.
- [82] Thomas A. ZANG et M. Youssuf HUSSAINI. « Numerical experiments on subcritical transition mechanisms ». In : *23rd Aerospace Sciences Meeting*. American Institute of Aeronautics et Astronautics, jan. 1985. DOI : 10.2514/6.1985-296. URL : <https://doi.org/10.2514%2F6.1985-296>.
- [83] Rong-Hua ZENG, Jianjun TAO et Yuanbo SUN. « Three-dimensional viscous Rayleigh-Taylor instability at the cylindrical interface ». In : *Physical Review E* 102.2 (août 2020), p. 023112. DOI : 10.1103/physreve.102.023112. URL : <https://doi.org/10.1103%2Fphysreve.102.023112>.

# Liste des abbréviations

**BiCG** BiConjugate Gradient

**BiCGStab** Stabilized BiConjugate Gradient

**CG** Conjugate Gradient

**CN** Crank–Nicholson

**DFT** Discrete Fourier Transform

**DNS** Direct Numerical Simulation

**DSA** Densité Spectrale d’Amplitude

**DSE** Densité Spectrale d’Énergie

**FFT** Fast Fourier Transform

**FFTW** Fastest Fourier Transform in the West

**FLSMSN** Fédération Lyonnaise de Modélisation et Sciences Numériques

**FP** Fixed Point

**GES** Gaz à Effet de Serre

**GIEC** Groupe d’experts Intergouvernemental sur l’Évolution du Climat

**GMRES** General Minimal Residual

**HDF5** Hierarchical Data Format 5

**IPA** Interface de Programmation d’Applications

**IPCC** Intergovernmental Panel on Climate Change

**LMFA** Laboratoire de Mécanique des Fluides et d’Acoustique

**MPI** Message Passing Interface

**P2CHPD** Pôle de Compétence en Calcul Hautes Performances Dédiés

**PDF** Probability Density Function

**PMCS2I** Pôle de Modélisation et de Calcul en Sciences de l’Ingénieur et de l’Information

**POUSSINS** Parallel Open-source Unsteady Spectral Solver for Inhomogeneous Navier–Stokes

**RK2** Runge–Kutta 2

**RK2/CN** Runge–Kutta 2/Crank–Nicholson

**RK3** Runge–Kutta 3

**RK3/CN** Runge–Kutta 3/Crank–Nicholson

**RK4** Runge–Kutta 4

**RMR** Richardson Minimal Residual

**ROAST** Real-time Open-source Analysis Software for Turbulence

**RTI** Rayleigh–Taylor Instability

**SSP** Strong-Stability Preserving

**SSPRK3** Strong-Stability Preserving Runge–Kutta 3

**THI** Turbulence Homogène Isotrope

**VDINSE** Variable-Density Incompressible Navier–Stokes Equations

# Glossaire

## approximation de Boussinesq

Approximation utilisée pour modéliser les écoulements à densité variable négligeant les effets de variation de densité sauf dans le terme de flottaison. Cette approximation ne s'applique que lorsque les gradients de densité sont faibles, notamment dans les écoulements avec des différences de température dans lesquels les variations de densité sont principalement dues à des gradients de température. Elle est nommée en hommage à l'hydraulicien français JOSEPH BOUSSINESQ.

## conditionnement

Mesure de la variation de la valeur de sortie d'une fonction pour une petite variation des paramètres d'entrée. Par exemple, le conditionnement associé au système linéaire  $\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$  donne une borne sur l'inexactitude de la solution  $\mathbf{x}$  après approximation. Un problème avec un faible conditionnement est considéré comme bien conditionné, tandis qu'un problème avec un conditionnement élevé est considéré comme mal conditionné. Pour des systèmes linéaires, l'efficacité et la précision d'une inversion de matrice est fortement corrélée avec la qualité de son conditionnement. Ce dernier se calcule à partir des valeurs propres de la matrice, ou dans les cas problématiques, à partir d'une décomposition en valeurs singulières. Dans ce document, le conditionnement d'une matrice  $\mathbf{A}$  est noté  $\kappa(\mathbf{A})$ .

## Densité Spectrale d'Énergie

Mesure de la répartition d'énergie d'un signal dans le domaine spectral (fréquentiel). Elle indique comment l'énergie totale du signal est répartie sur différents modes. En d'autres termes, elle permet de quantifier la contribution relative de chaque mode à l'énergie totale du signal. Pour un signal (une quantité physique scalaire)  $\varphi$ , la densité spectrale d'énergie est définie par

$$\text{DSE } \varphi = \|\hat{\varphi}\|_2$$

où  $\hat{\varphi}$  est la transformée de Fourier de  $\varphi$ . Le spectre d'énergie turbulente est équivalent à la densité spectrale d'énergie du signal du champ de vitesse. Il quantifie la contribution relative de chaque mode à l'énergie cinétique (par unité de masse) totale de l'écoulement. La racine carrée de la DSE

$$\text{DSA } \varphi = \sqrt{\text{DSE } \varphi} = \sqrt{\|\hat{\varphi}\|_2},$$

nommée Densité Spectrale d'Amplitude (DSA), mesure la répartition de la contribution de chaque mode à l'amplitude totale du signal.

## Direct Numerical Simulation

(*Simulation Numérique Directe*) Simulation dans laquelle les équations de Navier–Stokes sont résolues numériquement sans utiliser de modèle de turbulence. Toutes les échelles spatiales de la turbulence doivent être résolues dans le maillage, des plus petites échelles dissipatives jusqu'à l'échelle intégrale  $L$ , ce qui entraîne des coûts de calcul significatifs.

### Discrete Fourier Transform

(*Transformation de Fourier Discrète*) Approximation de la transformée de Fourier qui opère sur un ensemble discret de points de données. Elle décompose un ensemble de données en ses composantes fréquentielles constitutives. Elle peut être implémentée efficacement en utilisant des algorithmes tels que FFTW pour accélérer le calcul.

### échelle de Taylor

échelle de longueur utilisée pour quantifier la taille des structures turbulentes. Plus précisément, elle correspond à la plus grande des échelles dissipatives. En dessous de cette échelle, les effets visqueux dominent la dynamique turbulente. Symbolisée par  $\lambda$  dans ce document et définie dans l'équation (1.44b) page 19.

### échelle intégrale

échelle de longueur associée aux structures contenant la majeure partie de l'énergie cinétique, c'est-à-dire les plus grands tourbillons. Symbolisée par  $L$  dans ce document et définie dans l'équation (1.44a) page 18. Dans la littérature, elle peut également être désignée par  $L_0$ ,  $L_{11}$  ou  $\ell$ .

### éclatement tourbillonnaire

(*Vortex breakdown*) Phénomène se produisant dans un écoulement tourbillonnaire ou en rotation, lorsque les conditions deviennent instables et que les tourbillons existants subissent une transition brusque. Ce phénomène se caractérise généralement par la rupture ou la déformation des tourbillons, créant ainsi une modification significative de la dynamique de l'écoulement.

### écoulement incompressible

Écoulement dont le volume élémentaire de chaque particule fluide ne varie pas au cours du temps. Mathématiquement, cela se traduit par

$$\lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = 0.$$

Dans le cas à densité constante, cette hypothèse conduit à un champ de vitesse à divergence nulle :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

### enstrophie

Quantité, définie comme la norme du carré de la vortacité, permettant de mesurer la quantité de vortacité, et donc de tourbillons/vortex, présente dans l'écoulement.

### équation elliptique

Classe d'équation aux dérivées partielles du second ordre de la forme

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^n b_i(\mathbf{x}) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + c(\mathbf{x}) \varphi = f(\mathbf{x})$$

dans laquelle la matrice symétrique carré  $[a_{ij}(\mathbf{x})]$  des coefficients du second ordre n'a que des valeurs propres non nulles et de même signe. Des exemples simples d'équations elliptiques sont l'équation de Laplace  $\nabla^2 \varphi = 0$ , l'équation de Poisson  $\nabla^2 \varphi = f$  et l'équation de Helmholtz  $\nabla^2 \varphi = -\lambda^2 \varphi$ .

### équations de Navier–Stokes

Équations aux dérivées partielles décrivant l'écoulement d'un fluide visqueux. Elles expriment la conservation de la quantité de mouvement et la conservation. Elles sont nommées ainsi pour honorer les travaux de l'ingénieur français HENRI NAVIER et du physicien anglo-irlandais GEORGE GABRIEL STOKES.

**FFTW**

Bibliothèque open-source hautement optimisée pour le calcul de la transformation de DFT et de ses variantes. Elle fournit des algorithmes efficaces et précis pour transformer des données unidimensionnelles, bidimensionnelles et multidimensionnelles entre le domaine temporel et le domaine fréquentiel. Dans le travail présenté ici, cette bibliothèque est utilisée pour le calcul des gradients par des méthodes spectrales.

**flatness**

(*coefficient d'aplatissement*) Mesure statistique, notée  $F$  dans ce document, qui quantifie le degré d'aplatissement ou d'étalement des valeurs d'un ensemble de données autour de leur moyenne. Il permet d'évaluer la concentration ou la dispersion des données par rapport à la moyenne, en mettant l'accent sur les queues de la distribution et la présence de valeurs extrêmes.

**GIEC**

(*Intergovernmental Panel on Climate Change*) Organisation scientifique internationale créée en 1988 par le Programme des Nations Unies pour l'environnement. L'organisation a pour mission principale d'évaluer de manière exhaustive, impartiale et régulière l'état des connaissances sur les changements climatiques d'origine humaine, leurs impacts potentiels et les stratégies d'adaptation et d'atténuation possibles.

**HDF5**

Modèle de données, format de fichier et bibliothèque logicielle conçus pour le stockage, l'organisation et la gestion de grands ensembles complexes de données scientifiques et numériques. Il fournit un moyen flexible et efficace de stocker et d'accéder aux données, ce qui le rend largement utilisé dans la recherche scientifique, l'ingénierie et les applications à forte intensité de données. Dans le travail présenté, cette bibliothèque est utilisée pour le stockage et le transfert parallélisé des données.

**instabilité de Richtmyer–Meshkov**

Instabilité caractérisée par la perturbation de deux fluides de densités différentes lorsqu'ils sont soumis à un choc ou à une onde choc. Cette instabilité conduit à la formation de structures tourbillonnaires et à la création de structures de mélanges. Elle est nommée en hommage au physicien américain ROBERT RICHTMYER qui a fourni une prévision théorique et au physicien russe Evgeni Meshkov qui a donné la vérification expérimentale.

**loi de Kolmogorov**

Concept fondamental de la turbulence, formulé par le mathématicien russe ANDREÏ KOLMOGOROV, décrivant la distribution statistique des fluctuations de vitesse et de l'énergie dans la zone inertielle. Plus précisément, elle énonce que le spectre d'énergie suit une loi  $E(k) \sim k^{-5/3}$  dans cette gamme d'échelles.

**méthodes spectrales**

Approches numériques utilisées pour discrétiser et résoudre des équations différentielles en exploitant la décomposition spectrale d'une fonction dans un espace de fonctions de base. Plutôt que de discrétiser le domaine de calcul en un maillage régulier comme dans les méthodes numériques traditionnelles, les méthodes spectrales utilisent une approche basée sur les propriétés spectrales des opérateurs différentiels. Cela implique de représenter une fonction comme une somme pondérée de fonctions de base spécifiques, telles que les fonctions trigonométriques (séries de Fourier), les polynômes de Chebyshev, les polynômes de Legendre, etc. Dans les travaux présentés dans ce document, les fonctions sont décomposées en série de Fourier est le choix de la méthode spectrale

est détaillé dans la section 2.1 page 22. Les étapes typiques d'une méthode spectrale comprennent la sélection des fonctions de base appropriées, la transformation du problème continu en un problème discret en exprimant les dérivées sous forme spectrale, la résolution des équations discrètes pour obtenir les coefficients de la décomposition spectrale, et enfin, la reconstruction de la solution à partir de ces coefficients. Les méthodes spectrales sont particulièrement puissantes pour la résolution de problèmes linéaires et non linéaires, car elles convergent rapidement vers des solutions précises, surtout lorsque la fonction à résoudre est suffisamment régulière. Cependant, elles peuvent exiger une certaine expertise dans la sélection des fonctions de base et la gestion de problèmes de condition aux limites, en particulier pour des géométries complexes.

### mode de Fourier

Composante individuelle dans la décomposition d'une fonction périodique en une série de Fourier. Lorsqu'une fonction temporelle est décomposée, chaque mode est associé à une fréquence. Lorsqu'une fonction spatiale est décomposée, chaque mode est associé à un nombre d'onde. Dans les travaux présentés dans ce document, les méthodes spectrales sont utilisées pour discrétiser en espace les champs de l'écoulement et chaque mode est associé à un nombre d'onde noté  $k$ .

### MPI

Protocole de passage de message entre fils d'exécution fournissant une manière standardisée et portable pour le calcul parallèle sur des systèmes à mémoire distribuée. Il permet la communication et la coordination entre plusieurs processus ou nœuds dans un environnement de calcul parallèle, facilitant ainsi l'échange de données et la synchronisation efficace.

### nombre de Froude

Paramètre sans dimension, symbolisé par  $Fr$  dans ce document, utilisé pour décrire l'importance relative des forces d'inertie et des forces de gravité dans un écoulement. Il est défini comme le rapport de la vitesse caractéristique de l'écoulement et la vitesse de propagation des ondes de gravité dans le fluide. Il s'exprime généralement par

$$Fr = \frac{v}{\sqrt{gL}}$$

où  $v$  est la vitesse caractéristique de l'écoulement,  $g$  l'accélération de la pesanteur, et  $L$  une longueur caractéristique du système. Un nombre de Froude inférieur à 1 indique que les forces de gravité dominent et l'écoulement est dit « subcritique », tandis qu'un nombre de Froude supérieur à 1 indique que les forces d'inertie sont prédominantes et l'écoulement est dit « supercritique ».

### nombre de Péclet

Paramètre sans dimension, symbolisé par  $Pe$  dans ce document, utilisé pour caractériser l'importance relative entre les effets convectifs et les effets diffusifs dans un processus de transport. Il est particulièrement pertinent pour les problèmes de transfert de chaleur, de masse ou de quantité de mouvement dans les fluides ou les milieux poreux. Dans le contexte d'un transfert de masse (convection-diffusion), il est défini comme

$$Pe = \frac{vL}{D}$$

où  $V$  et  $L$  sont les vitesses et longueurs caractéristiques de l'écoulement et  $D$  est le coefficient de diffusion de masse. Il s'exprime également en fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Schmidt comme

$$Pe = Re Sc.$$

Si le nombre de Péclet est grand devant 1, cela signifie que la convection joue un rôle dominant dans le processus de transport, tandis que si le nombre de Péclet est petit devant 1, la diffusion est prépondérante.

**nombre de Reynolds**

Paramètre sans dimension, symbolisé par  $Re$  dans ce document, utilisé pour décrire le régime d'écoulement et prédire la nature du mouvement fluide. Il représente le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses dans un écoulement de fluide. Pour de faibles nombres de Reynolds, les forces visqueuses dominent et l'écoulement est généralement lisse, laminaire et bien ordonné. À mesure que le nombre de Reynolds augmente, les forces inertielles deviennent prépondérantes, ce qui peut entraîner des phénomènes turbulents et chaotiques. Dans l'étude présentée dans ce document, le nombre de Reynolds est défini par l'équation (1.25) page 12

**nombre de Schmidt**

Paramètre sans dimension, symbolisé par  $Sc$  dans ce document, utilisé pour décrire l'importance relative de la diffusion de la quantité de mouvement par rapport à la diffusion de la masse. Il est défini comme le rapport entre la diffusivité de la quantité de mouvement (viscosité cinématique) et la diffusivité de la masse (diffusivité moléculaire). Un faible nombre de Schmidt indique que la diffusion de masse se produit plus rapidement par rapport à la diffusion de la quantité de mouvement, ce qui implique un mélange et un transport efficaces de la quantité scalaire. En revanche, un nombre de Schmidt élevé suggère que la quantité de mouvement se diffuse plus rapidement par rapport à la diffusion de la masse, ce qui entraîne un mélange et un transport plus lents de la quantité scalaire. Dans l'étude présentée dans ce document, le nombre de Schmidt est défini par l'équation (1.25) page 12

**OpenMPI**

Implémentation open-source du protocole MPI. Dans le travail présenté ici, cette bibliothèque est utilisée durant la DNS pour distribuer les calculs entre plusieurs processus : le domaine de calcul est divisé spatialement et chaque processus résout les équations dans sa partie allouée du domaine. Elle est également utilisée lors de l'étape de post-traitement pour calculer simultanément en parallèle des quantités sur plusieurs instantanés de simulation.

**opérateur de diffusion de masse semi-implicite**

Opérateur de diffusion de masse utilisé dans l'avancement en temps semi-implicite de l'équation de masse (2.22b) page 30. Il est défini dans l'équation (2.24) page 30.

**opérateur de diffusion semi-implicite**

Opérateur de diffusion de quantité de mouvement à densité variable utilisé dans l'avancement en temps semi-implicite de l'équation de quantité de mouvement (2.22a) page 30. Il est défini dans l'équation (2.23) page 30.

**opérateur de projection**

Opérateur utilisé pour projeter le champ de vitesse intermédiaire (avec une divergence non nulle) dans l'espace des vecteurs à divergence nulle. Il est défini dans l'équation (2.5) page 24 pour les écoulements à densité constante, et dans l'équation (2.8) page 24 pour les écoulements à densité variable.

**POUSSINS**

Code de simulation DNS pour les équations de Navier–Stokes incompressibles et à densité variable. Il possède une précision spectrale spatiale, des méthodes d'intégration temporelle allant jusqu'à l'ordre 4, et un noyau parallélisé à mémoire distribuée. Le code est implémenté en FORTRAN et utilise les bibliothèques OpenMPI et FFTW. À l'origine développé par BASTIEN DI PIERRO lors de sa thèse, il est actuellement utilisé par l'équipe Turbulence et Instabilité au LMFA. Son noyau a été étendu au cours de ce travail pour permettre la simulation d'écoulements turbulents.



**préconditionnement**

Application d'une transformation, appelée préconditionneur, qui conditionne un problème donné sous une forme plus adaptée aux méthodes de résolution numérique. Le préconditionnement est généralement lié à la réduction du conditionnement du problème. Le problème préconditionné est ensuite généralement résolu par une méthode itérative. D'un point de vue matriciel, pour résoudre un système matriciel  $\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$ , on peut utiliser une matrice de préconditionnement  $\mathbf{M}$  afin de travailler sur le système préconditionné  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{Ax} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$ , où  $(\mathbf{M} \cdot \mathbf{A})$  est mieux conditionné que  $\mathbf{A}$ .

**Probability Density Function**

(*Fonction de Densité de Probabilité*) Fonction utilisée pour décrire la distribution des probabilités d'une variable aléatoire continue. La PDF permet de quantifier la probabilité que la variable prenne une valeur donnée dans un intervalle défini. Cet outil est utilisé dans l'étude statistique de la turbulence pour décrire la distribution des valeurs de vitesses et des autres champs dans l'écoulement.

**projection**

Technique utilisée pour faire avancer en temps les équations de Navier–Stokes incompressibles tout en assurant la conservation de la masse et la convergence de la pression. Elle consiste à calculer une vitesse de projection intermédiaire avec une divergence non nulle, puis à la projeter dans l'espace vectoriel à divergence nulle en calculant un champ de pression et en utilisant un opérateur de projection. Cette technique est détaillée dans la section 2.1.2.

**Rayleigh–Taylor Instability**

Instabilité d'une interface entre deux fluides de densités différentes qui se produit lorsque le fluide léger pousse le fluide plus lourd. Un exemple est le comportement de l'eau suspendue au-dessus de l'huile dans un champ gravitationnel. Cette instabilité est nommée en hommage à LORD RAYLEIGH et G.I. TAYLOR.

**ROAST**

Boîte à outils de post-traitement pour les simulations DNS de turbulence. Il s'agit d'un module Python parallélisé qui utilise les bibliothèques NumPy, SciPy, mpi4py, PyFFTW et h5py.

**skewness**

(*coefficient d'asymétrie*) Mesure statistique, notée  $S$  dans ce document, utilisée pour quantifier l'asymétrie de la distribution des valeurs d'un ensemble de données autour de leur moyenne. Il permet de déterminer si la distribution est plus étalée vers la gauche (skewness négatif) ou vers la droite (skewness positif) par rapport à la moyenne.

**solénoïdal**

Qualifie un champ vectoriel dont la divergence est nulle en tout point d'un domaine spécifié. Le champ de vitesse d'un écoulement incompressible est solénoïdal. Dans le cas d'un écoulement à densité variable, la vitesse moyennée par la masse est solénoïdale.

**spectre d'énergie turbulente**

Grandeur spectrale, équivalente à la Densité Spectrale d'Énergie du champ de vitesse, utilisée pour quantifier les niveaux d'énergie cinétique de chaque taille de structure de l'écoulement, associée à un mode de Fourier. Le calcul du spectre, noté  $E(k)$  dans ce document, est détaillé dans la section 1.3.2 page 16.

**temps de retournement**

Grandeur caractéristique, notée  $T$  dans ce document, utilisée pour décrire la rapidité avec laquelle les tourbillons ou les structures cohérentes dans un écoulement se forment et se dissipent. Il représente le temps moyen nécessaire pour qu'une particule fluide effectue une rotation complète ou revienne à une position similaire dans l'écoulement. Dans un écoulement turbulent, les fluctuations se produisent à différentes échelles, ce qui signifie que le temps de retournement peut varier d'une échelle à une autre. Dans ce document, le temps de retournement  $T$  fait référence spécifiquement au temps de retournement associé à l'échelle intégrale, caractérisant les grandes échelles de l'écoulement. Cette grandeur est utilisée comme échelle de temps pour la description de l'écoulement turbulent.

**thread**

(*fil d'exécution*) Plus petite unité d'exécution à l'intérieur d'un processus informatique. Un processus est un programme en cours d'exécution sur un ordinateur et un thread est une séquence d'instructions qui peut être exécutée de manière indépendante par le processeur. Un processus peut comporter un ou plusieurs threads, et chaque thread partage les mêmes ressources du processus, telles que la mémoire, le fichier ouvert et les descripteurs de fichiers. Cependant, chaque thread a son propre état d'exécution, y compris son registre, sa pile et son compteur de programme, ce qui lui permet de fonctionner de manière indépendante des autres threads du même processus. Dans cette étude, les threads sont utilisés lors des calculs et des accès aux données parallélisés. Les processus multithread permettant d'exploiter les processeurs multicœurs et d'améliorer les performances en parallélisant les tâches.

**transformation de Fourier**

Transformation mathématique qui permet de décomposer une fonction (souvent une fonction périodique) en une combinaison de fonctions sinus et cosinus, ou en termes complexes exponentiels, dans le but d'analyser ses composantes fréquentielles. Formellement, pour une fonction  $f(x)$  continue, sa transformation de Fourier  $\mathcal{F}f(k)$  est définie par

$$\mathcal{F}f(k) = \hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp -i2\pi kx \, dx.$$

Dans les méthodes numériques, la transformation de Fourier est approximée par la Discrete Fourier Transform. Elle est nommée en hommage au physicien français JOSEPH FOURIER qui a introduit cette transformation.

**Turbulence Homogène Isotrope**

Modèle de la turbulence utilisée pour des applications fondamentales ou pour la simulation d'écoulements isotropes, dans lequel les propriétés statistiques de la turbulence sont uniformes dans toutes les directions et indépendantes de la position dans l'espace. Le but de ce travail est d'analyser l'interaction entre un écoulement modélisé par la THI et les effets à densité variable. Une des caractéristiques notables de la THI est que le spectre d'énergie turbulente est défini dans la zone inertielle par la loi de Kolmogorov.

**Variable-Density Incompressible Navier–Stokes Equations**

(*Équations de Navier–Stokes incompressible à densité variable*) Équations de Navier-Stokes incompressibles dans lesquelles le champ de densité varie dans l'espace et le temps en raison de la diffusion de masse décrite par la loi de Fick. Ce modèle est également désigné comme le modèle de Kazhikhov–Smagulov dans la littérature. La variable de vitesse résolue est la vitesse moyennée par le volume  $\mathbf{u}$ .

**vitesse moyennée par la masse**

Moyenne des vitesses des composants du fluide pondérée par leurs masses respectives. Elle est également appelée vitesse barycentrique et est définie dans l'équation (1.10) page 8. C'est l'une des deux représentations du champ de vitesse d'un écoulement à densité variable, l'autre étant la vitesse moyennée par le volume. Dans le cas des écoulements incompressibles, la vitesse moyennée par la masse n'est pas à divergence nulle, contrairement à l'autre option qu'est la vitesse moyennée par le volume

**vitesse moyennée par le volume**

Moyenne des vitesses des composants du fluide pondérée par leurs volumes respectifs. Elle est également appelée vitesse cinématique et est définie dans l'équation (1.12) page 8. C'est l'une des deux représentations du champ de vitesse d'un écoulement à densité variable, l'autre étant la vitesse moyennée par la masse. Dans le cas des écoulements incompressibles, la vitesse moyennée par le volume est à divergence nulle, contrairement à l'alternative qu'est la vitesse moyennée par la masse. La vitesse moyennée par le volume est le champ calculé par le code `POUSSINS`, et c'est ce champ qui est étudié dans le présent travail.

**zone inertielle**

Plage d'échelles de longueur de la turbulence où les forces inertielles dominent sur les forces visqueuses. Dans cette région, l'énergie cinétique est transférée des échelles de grande taille aux échelles plus petites à travers des interactions turbulentes, créant ainsi des structures cohérentes et des fluctuations turbulentes. Elle se situe entre les échelles de grande taille, où les forces visqueuses prédominent et les échelles de petite taille, où les effets visqueux dissipent l'énergie turbulente en chaleur.



## Avant-propos

Ce travail s'intéresse à la dynamique turbulente d'un écoulement incompressible caractérisé par d'importantes variations de masse volumique, représentatif d'un rejet atmosphérique à basse vitesse. Ces écoulements sont au cœur des préoccupations du 21e siècle et leur dynamique à densité variable, qui ne peut être correctement décrite par une approximation de type Boussinesq, demeure peu explorée.

L'objectif principal de cette étude est d'analyser le comportement d'une turbulence isotrope en interaction avec un champ de densité inhomogène au sein d'un processus de mélange. Pour ce faire, l'étude emploie une formulation où le champ de densité est traité comme un scalaire actif de l'écoulement incompressible. La complexité du problème a nécessité le développement d'une méthode numérique de précision spectrale, notamment en utilisant une technique de préconditionnement originale pour assurer une intégration en temps d'ordre deux des équations discrètes.

Dans ce contexte, des analyses statistiques et spectrales des données obtenues à partir de simulations numériques directes de turbulence isotrope à densité variable sont réalisées. L'objectif est de déterminer si l'introduction d'un champ de densité inhomogène a un impact sur le comportement observé dans le cas de la turbulence isotrope à densité constante.

Les résultats de cette étude mettent en évidence que l'introduction d'un champ de densité inhomogène dans une turbulence isotrope induit des modifications significatives des caractéristiques du champ de vitesse. Plus précisément, cette interaction conduit à la génération de structures de plus petites échelles au sein de l'écoulement. De plus, un pic d'énergie est observé dans les plus petites échelles du spectre d'énergie, attribué à une dynamique d'instabilité Rayleigh–Taylor.

## Abstract

This study focuses on the turbulent dynamics of an incompressible flow characterized by significant variations in density, representative of a low-speed atmospheric emission. Such flows are at the forefront of 21st-century concerns, and their density-variable dynamics, which cannot be accurately described by a Boussinesq-type approximation, remains largely unexplored.

The primary objective of this investigation is to analyze the behavior of isotropic turbulence interacting with an inhomogeneous density field within a mixing process. To achieve this, the study employs a formulation in which the density field is treated as an active scalar in the incompressible flow. The complexity of the problem necessitated the development of a high-precision spectral numerical method, including the use of an original preconditioning technique to ensure second-order time integration of the discrete equations.

In this context, statistical and spectral analyses of data obtained from direct numerical simulations of isotropic turbulence with variable density are conducted. The goal is to determine whether the introduction of an inhomogeneous density field has an impact on the behavior observed in the case of isotropic turbulence with constant density.

The results of this study highlight that the introduction of an inhomogeneous density field into isotropic turbulence induces significant modifications in the characteristics of the velocity field. Specifically, this interaction leads to the generation of smaller-scale structures within the flow. Furthermore, an energy peak is observed in the smallest scales of the energy spectrum, attributed to Rayleigh–Taylor instability dynamics.