Numéro d'ordre: 2005-52

Année 2005

Thèse de Doctorat

présentée devant

L'ECOLE CENTRALE DE LYON Ecole Doctorale MEGA

pour obtenir

le Diplôme de DOCTORAT Spécialité: MECANIQUE

par

Guoxin WEI

Modélisation stochastique du champ Lagrangien des vitesses de sous-maille en Simulation Numérique des grandes échelles

Directeur de thèse: Dr. Jean-Noël GENCE

Soutenance le 20 décembre devant la Commission d'Examen

Jury :

М.	L.	Shao	Chercheur, CNRS, Ecole Centrale de Lyon
М.	JP.	Bertoglio	Directeur de recherche, CNRS, Ecole Centrale de Lyon
М.	JN.	Gence	Professeur, Université Claude Bernard, Lyon 1
М.	V.	Sabelnikov	Rapporteur, Directeur de Recherche ONERA / DEFA
М.	R.	Rubinstein	Rapporteur, Docteur à NASA Langley / ICASE
М.	Р.	Bruel	Chercheur, UMR 5142 CNRS-UPPA

Remerciements

En débutant de mon DEA, j'entamais une expérience de recherche dans le domaine de la simulation numérique de la turbulence. Mon intérêt pour la compréhension du mouvement de la turbulence m'est venu progressivement à la suite de multiples échanges avec le corps professoral du laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (M. Gence, M. Shao et M. Simoëns).

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur le Professeur M. Lance, Directeur du Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique (LMFA) de l'Ecole Centrale de Lyon d'avoir bien voulu m'accueillir au sein de l'établissement.

Ce travail de recherche s'est effectué sous la codirection de Monsieur le Professeur J. N. Gence de Monsieur L. Shao et Monsieur S. Simoëns. Monsieur Gence m'a donné les bases physiques de la turbulence et du mélange stochastique. Grâce à ses connaissances et son professionnalisme dans l'enseignement, il m'a donné beaucoup de conseils.

Je tiens à remercier Monsieur L. Shao qui a su si judicieusement orienter mes travaux et doser ses encouragements et ses critiques. Il a accompli aussi la très pénible tâche de corriger mes fautes d'orthographe en français.

Je remercie également Monsieur S. Simoëns qui m'a fait découvrir un sujet passionnant constitué par la recherche fondamentale des problèmes d'environnement. Ses conseils pertinents m'ont permis de poser convenablement les problèmes et de faire ressortir les choses essentielles dans les résultats de mes calculs numériques.

Je veux exprimer ma gratitude à Monsieur le Professeur Z. Zhang, Mme. le Professeur G. Cui et Mme. le Professeur C. Xu de l'Université de Tsinghua en chine pour leurs soutiens scientifiques et humains pendant ces cinq années.

Mes remerciements s'adressent également à mes amis, thésards du laboratoire, en particulier C. Aguirre et I. Vincovic avec qui j'ai eu souvent des échanges et des discussions enrichissants.

Enfin Je remercie pour les personnels du laboratoire et le centre IDRIS ainsi que le CEA pour m'avoir accordé des heures de calcul pour ce travail.

A mon épouse et à ma famille que j'aime.

Table des matières

N	Notations 1		18	
In	trod	uction		21
1	Equ	ations	de base et méthode numérique	25
	1.1	Notion	ns principales	25
	1.2	Equat	ions de base	26
		1.2.1	Turbulence homogène et turbulence isotrope	26
		1.2.2	Equations dans l'espace physique	26
		1.2.3	Equations dans l'espace spectral	27
	1.3	Métho	odes de simulation numérique	30
		1.3.1	Introduction	30
		1.3.2	Simulation numérique directe : DNS	31
		1.3.3	Simulation des grandes échelles : LES	33
	1.4	Descri	iption Eulérienne et Lagrangienne	38
		1.4.1	Introduction	38
		1.4.2	Description Eulérienne	38
		1.4.3	Description Lagrangienne	41
	1.5	Condi	tion de simulation numérique	44
		1.5.1	Domaine de simulation	44

		1.5.2	Cas de simulation	45
		1.5.3	Schéma numérique	45
		1.5.4	Conditions aux limites	46
		1.5.5	Conditions initiales en temps	46
		1.5.6	Forçage pour le maintien d'une turbulence statistiquement station- naire	50
	1.6	Conclu	usion	51
2	Etu	de des	quantités statistiques importantes pour le mélange turbulent	52
	2.1	Introd	uction	52
	2.2	Quant	ités statistiques	53
		2.2.1	Corrélations de vitesse	53
		2.2.2	Echelles intégrales temporelles	55
	2.3	Choix	des paramètres de calcul	56
		2.3.1	Choix de la densité et de la distribution des particules initiales	56
		2.3.2	Choix du temps initial $t = t_0$ pour suivre des particules $\ldots \ldots$	59
	2.4	Corrél	ation de vitesse dans une turbulence homogène isotrope et stationnaire	61
		2.4.1	Corrélation en un-point en deux-temps	61
		2.4.2	Corrélation en deux-points en deux-temps	68
		2.4.3	Corrélations entre des échelles spatiales différentes	71
	2.5	Corrél	ation de vitesse dans un écoulement non-stationnaire	74
		2.5.1	Influence du temps initial sur les corrélations de vitesse dans une turbulence non-stationnaire	76
		2.5.2	Comparaison entre les corrélations de vitesse obtenues dans une turbulence stationnaire et dans une turbulence non-stationnaire	79
	2.6	Echell	es intégrales temporelles dans une turbulence stationnaire \ldots .	81
	2.7	Conclu	nsion	83

3	Mo	dèle st	ochastique de Langevin	85
	3.1	Introd	uction	85
	3.2	Le mo	puvement brownien	86
	3.3	Introd	uction de l'équation de Langevin	86
	3.4	Rappe	el sur l'équation de Langevin classique	87
	3.5	Modèl	e stochastique à une particule en turbulence homogène isotrope $\ . \ .$	88
		3.5.1	Approche discrète	88
		3.5.2	Equation de Fokker-Planck	91
		3.5.3	L'équation de Langevin en forme continue	93
		3.5.4	Le modèle de T_L et le paramètre C_0	93
		3.5.5	Effets de non-stationnarité de la turbulence	97
	3.6	Modèl	e stochastique en turbulence inhomogène	98
		3.6.1	Etat de l'art avant 1987	98
		3.6.2	Modèle de Thomson (1987) $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	99
		3.6.3	Modèles différents	101
	3.7	Applie	cation du modèle stochastique aux vitesses de sous-maille	102
		3.7.1	Formulation du modèle	103
		3.7.2	Détermination des grandeurs de sous-maille	103
	3.8	Conclu	usion	107
4	LES	5 coup	lée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille	108
	4.1	Condi	tions de Calcul	108
	4.2	Influer un-poi	nce du modèle de sous-maille sur les corrélations de la vitesse en int et en deux-temps	109
		4.2.1	Cas de turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire	109
		4.2.2	Turbulence homogène isotrope en décroissance	119
	4.3	Echell	e intégrale temporelle Lagrangienne T_L	121

		4.3.1	L'échelle T_L en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire
		4.3.2	L'échelle T_L dans une turbulence homogène isotrope en décroissance 124
	4.4	Foncti	on de structure temporelle Lagrangienne
	4.5	Dépla statist	cement et dispersion des particules en turbulence homogène isotrope iquement stationnaire
	4.6	Conclu	usion
5	Diff	fusion	Lagrangienne d'un scalaire passif 130
	5.1	Introd	uction \ldots
	5.2	Etude	théorique
		5.2.1	Equation de diffusion d'un scalaire
		5.2.2	Modèle de diffusion Lagrangien
	5.3	Etude	de l'échelle intégrale temporelle de la diffusion d'un scalaire 133
		5.3.1	Travaux de recherches antérieurs
	5.4	Diffus	ion d'un scalaire passif dans une turbulence homogène $\ldots \ldots \ldots 138$
		5.4.1	Expérience de Huq et Britter (1994)
		5.4.2	Etude qualitative
		5.4.3	Résultats de l'étude qualitative
		5.4.4	Résultats quantitatifs et analyse
	5.5	Diffus	ion d'un scalaire passif dans une turbulence inhomogène non cisaillée $\ 157$
		5.5.1	Caractéristiques de la turbulence inhomogène sans cisaillement en décroissance
		5.5.2	L'expérience de Zhang (2003)
		5.5.3	Simulation numérique en LES
		5.5.4	Résultats et confrontation à l'expérience de Zhang X.H. [1,2] 172
	5.6	Conclu	usion

Co	Conclusion 1		
	Annexes	184	
Ι	Interpolation	185	
Π	Filtre	188	
II	Nombres aléatoires	190	
	III.1 Variables aléatoires uniformes	. 190	
	III.2 Variables aléatoires normales	. 190	
Bi	Bibliographie 192		

Liste des figures

1.1	Mouvement d'une particule. Une méthode d'interpolation précise est obli- gatoirement utilisée	43
1.2	Le domaine et la maille de simulation	44
1.3	Spectre d'énergie initial. Expérience de Comte-Bellot	47
1.4	Génération le champ de vitesse initiale pour le cas d'inhomogénéité	49
1.5	Génération d'une turbulence inhomogène sans cisaillement	50
1.6	Le spectre d'énergie avec le forçage extérieur. DNS 256 ³ . $Re_{\lambda} = 94$	50
1.7	Le spectre d'énergie avec le forçage extérieur aux cas de nombres de Reynolds différents.	51
2.1	Lancement d'une particule à un instant différent et une position spatiale différente.	57
2.2	Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents nombres de particules lancées. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao. (1 réalisation)	57
2.3	Energie cinétique de la turbulence à différentes périodes. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao	58
2.4	Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents nombres de particules. On fait la moyenne sur 10 à rélisations. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao	59
2.5	L'énergie et la dissipation de la turbulence. Résultat de DNS 256^3 , Cas A_2 .	60
2.6	Stabilité de l'énergie cinétique pour $t \ge 0.5s$. Cas A_2 , DNS 128 ³	60
2.7	Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents intervalles de temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur.	62

2.8	Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents intervalles de temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao	62
2.9	Corrélation de la vitesse pour des cas de résolution numérique différents. Cas A_2 , modèle de Chollet-Lesieur. La figure de gauche concerne le point de vu Eulérien, et celle de droite le point de vu Lagrangien	63
2.10	Comparaison les deux modèles de sous-maille. La figure de gauche con- cerne la corrélation de vitesse Eulérienne, et celle de droite la corrélation Lagrangienne. Cas A_1 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 65 \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$	64
2.11	Comparaison les deux modèles de sous-maille. Cas A_2 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 94$.	64
2.12	Comparaison les deux modèles de sous-maille. Cas A_3 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 135$.	65
2.13	Corrélation de la vitesse Eulérienne et Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. $Re_{\lambda} = 94$. $T_L = 0.129(s)$. $T_E = 0.190(s)$.	66
2.14	Corrélation de la vitesse Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. $Re_{\lambda} = 94.$	66
2.15	Corrélation de la vitesse Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire en temps court. $Re_{\lambda} = 94$. $T = T_{\lambda}$. $c = -\frac{\pi}{4} \alpha^2$	67
2.16	Corrélation de vitesse Eulérienne en deux-points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. M représente la taille de maille. 1M	
	$= 1 \Delta = \frac{L}{N}$, où L est la longueur du domaine de simulation, et N nombre de maille dans une direction. La figure de droite est normalisée par la valeur maximum dans la direction y et par le temps intégral dans la direction x .	68
2.17	Corrélation de vitesse Eulérienne en deux-points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao	69
2.18	Corrélation de vitesse Lagrangienne en deux points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. M représente la taille de maille de simulation.	70
2.19	Corrélation de vitesse Lagrangienne en deux points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao	70
2.20	Corrélation de vites se Eulérienne par le filtre 'Narrow-Band'. $Re_{\lambda}=94.$	72
2.21	Corrélation de vitesse Eulérienne par le filtre 'Narrow-Band' et normalisée par l'échelle temporelle. $Re_{\lambda} = 94$	75

2.22	Corrélation de vitesse Eulérienne obtenue par la DNS de Squires. $Re_{\lambda} = 43$. Nombre d'onde: $k = 2 + 5n$, et $n = 1, 2, 11$	75
2.23	Décroissance de l'énergie cinétique pour une turbulence non-stationnaire. $Re_{\lambda} = 65$	76
2.24	Comparaison le spectre d'énergie dans une turbulence homogène en décroissance. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 65$	e. 77
2.25	Spectre d'énergie en temps différents dans une turbulence homogène en décroissance. Résultats de DNS 256^3 . $Re_{\lambda} = 94. \ldots \ldots \ldots \ldots$	77
2.26	Evolution d'énergie cinétique dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement non-stationnaire. $Re_{\lambda} = 94$	78
2.27	Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=94$	78
2.28	Energie cinétique pour les turbulences stationnaire et non-stationnaire. LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 94$	79
2.29	Corrélation de vitesse Lagrangienne pour des turbulences homogènes isotropes stationnaire et non-stationnaire. Résultat de DNS. $Re_{\lambda} = 94. \ldots \ldots$	80
2.30	Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope stationnaire et non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94$	80
2.31	Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope stationnaire et non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 65$	81
2.32	Echelle intégrale temporelle. La figure de gauche concerne le temps Eulérien, et celle de droite le temps Lagrangien. Cas A_2 , LES 64^3	81
3.1	La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda} = 65$	96
3.2	La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda} = 94$	96
3.3	La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda} = 135$	97
3.4	Décomposition d'énergie cinétique de la turbulence	.04
3.5	Représentation des zones d'interaction entre échelles résolues et échelles sous-maille.	105

4.1	Corrélation de la vitesse Lagrangienne. La figure de droite concerne les temps courts. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 94. \ldots \ldots$
4.2	Corrélation de la vitesse Lagrangienne. La figure de droite concerne les temps courts. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94. \ldots \ldots$
4.3	Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. Cas A_1 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 65$ 111
4.4	Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=65$ 112
4.5	Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda}=94.112$
4.6	Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=94$ 112
4.7	Corrélation de vitesse Lagrangienne. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 135.113$
4.8	Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=135$. 113
4.9	Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 65114$
4.10	Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94115$
4.11	Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 135.$
4.12	Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet- Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao
4.13	Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} = 94$. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao
4.14	Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} = 135$. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao
4.15	Corrélation de vitesse Eulérienne en DNS. La figure de droite correspond aux temps courts

4.16	Corrélation de vitesse Lagrangienne en DNS. La figure de droite correspond aux temps courts	118
4.17	Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES combinée avec le modèle stochas- tique Lagrangien. Modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur. La figure de droite correspond aux temps courts	118
4.18	Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES combinée avec le modèle stochas- tique Lagrangien. Modèle de sous-maille de Cui-Shao. La figure de droite correspond aux temps courts.	119
4.19	Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES. Cas B_2 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 94$. Modèle de sous-maille de Cui-Shao.	120
4.20	Corrélation de vitesse Lagrangienne dans la turbulence homogène isotrope en décroissance en LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao. La figure de gauche correspond à $Re_{\lambda} = 65$, et celle de droite à $Re_{\lambda} = 135$	120
4.21	Echelle intégrale temporelle Lagrangienne. Cas A_2 , $Re_{\lambda} = 94$. La figure de gauche correspond au modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao	121
4.22	Fonction de structure Lagrangienne. $Re_{\lambda} = 94$, $T_L = 0.129(s)$. La figure de gauche correspond au modèle de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao	125
4.23	Fonction de structure Lagrangienne. $Re_{\lambda} = 135$, $T_L = 0.134(s)$. La figure de gauche correspond au modèle de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao	126
4.24	Dispersion des particules à terme court. $Re_{\lambda} = 94$, $T_L = 0.129(s)$	128
4.25	rms(X) des particules. $Re_{\lambda} = 94$. La figure de droite correspond aux temps courts	128
4.26	rms(X) des particules. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de droite correspond aux temps courts	129
5.1	Mélange aléatoire	132
5.2	Résultat de DNS. $S_c = 1$	136
5.3	Résultat de DNS	136
5.4	Concentration moyenne dans l'expérience de Huq et Britter. $T = 15T_{\Lambda}$	139
5.5	Profil de la concentration moyenne. $t = 15T_{\Lambda}$	143
5.6	Rms des fluctuations du scalaire. $t = 15T_{\Lambda}$	144

5.7	Corrélation des fluctuations du scalaire
5.8	Energie de fluctuation
5.9	Epaisseur de dispersion de scalaire. Sc=700
5.10	Concentration moyenne. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$ pour la figure de gauche, $T = 15T_{\lambda}$ pour celle de droite
5.11	Fluctuation de concentration. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$ pour la figure de gauche, $T = 15T_{\lambda}$ pour celle de droite
5.12	Concentration moyenne. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$
5.13	Concentration moyenne. Sc= 700. $T = 7T_{\Lambda}$
5.14	Concentration moyenne. Sc=700. $T = 15T_{\Lambda}$
5.15	Concentration moyenne. Sc=7. $T = 15T_{\Lambda}$
5.16	Comparaison de la concentration moyenne pour différents nombres de Schmidt, à $T = 15T_{\Lambda}$
5.17	Evolution temporelle de la concentration moyenne. $Sc = 700151$
5.18	Variance des fluctuations du scalaire. $Sc = 700$. $T = 4T_{\Lambda}$
5.19	Variance des fluctuations du scalaire. $Sc = 700$. $T = 7T_{\Lambda}$
5.20	Variance des fluctuations du scalaire. $Sc = 700$. $T = 15T_{\Lambda}$
5.21	Variance des fluctuations du scalaire. $Sc = 7$. $T = 15T_{\Lambda}$
5.22	Variance des fluctuations du scalaire pour différents nombres de Schmidt. $T = 15T_{\Lambda}$
5.23	Evolution de la variance des fluctuations du scalaire au cours du temps. Sc = 700.
5.24	Skewness. $Sc = 700155$
5.25	Coefficient Is du scalaire. $Sc = 700$. $T = 15T_{\Lambda}$
5.26	Flux de scalaire. $Sc = 700$. $T = 4T_{\Lambda}$
5.27	Flux de scalaire. $Sc = 700$. $T = 7T_{\Lambda}$
5.28	Flux de scalaire. $Sc = 700$. $T = 15T_{\Lambda}$
5.29	Flux de scalaire. $Sc = 7$. $T = 15T_{\Lambda}$

5.30	Flux de scalaire pour différents nombres de Schmidt à $T = 15T_{\Lambda}$ 159
5.31	Evolution du flux de scalaire en temps. Sc=700
5.32	Spectre de l'énergie au début de calcul. LES 64^3
5.33	Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z au début du calcul. $t = 0$ (s) 162
5.34	Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z au cours du calcul. $t = 0.5$ (s) 162
5.35	Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z à la fin du calcul. $t = 1.5$ (s) 163
5.36	Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z au début du calcul. $t = 0$ (s) 163
5.37	Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z au cours du calcul. $t = 0.5$ (s) 164
5.38	Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z à la fin du calcul. $t = 1.5$ (s) 164
5.39	Corrélation de vitesse Eulérienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda} = 65166$
5.40	Corrélation de vitesse Eulérienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda} = 65166$
5.41	Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. Zone quasi-homogène. $Re_{\lambda} = 65167$
5.42	Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. Zone de couche de mélange. $Re_{\lambda} = 65167$
5.43	Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de gauche concerne la position $z = 16$ (cm), et celle de droite $z = 17$ (cm)
5.44	Echelles intégrales temporelles Lagrangiennes pour les positions différentes en z. Cas C_1 , LES 64^3 . La zone correspondant aux petites valeurs de z est la zone des grandes échelles, celle qui correspond aux grands z est la zone des petites échelles
5.45	Dispositif expérimental
5.46	Domaine de simulation
5.47	Vitesse pour les positions différentes en z
5.48	Echelle intégrale temporelle Lagrangienne pour différentes positions en z 173
5.49	Spectre d'énergie pour différentes valeurs de z. La figure de gauche corre- spond à $t = 0$; celle de droite à $t = 4T_{\Lambda} \dots \dots$

5.50	5.50 Concentration moyenne à $t = 3T_{\Lambda}$. z_0 est la position centrale du mélange,		
	où $\frac{d^2u(z)}{dz^2} = 0$, H est l'épaisseur de la zône de mélange		
5.51	Variance de la fluctuation de concentration à $t = 3T_{\Lambda}$		
5.52	Variance de la fluctuation de la concentration à $t = 4T_{\Lambda}$		
5.53	Variance de la fluctuation de la concentration à $t = 6T_{\Lambda}$		
5.54	Evolution de variance de la fluctuation de concentration		
5.55	Flux de masse à $t = 3T_{\Lambda}$		
5.56	Flux de masse à $t = 4T_{\Lambda}$		
5.57	Flux de masse à $t = 6T_{\Lambda}$		
5.58	Evolution du flux de masse		
I.1	Interpolation par les polynômes de Lagrange en 3 dimensions		

Liste des tableaux

1.1	erreur de la rms de position de particules.	43
1.2	Cas de simulation.	45
2.1	Echelle intégrale temporelle Lagrangienne pour les différents d'intervalles de temps. LES 64^3 , Cas A_2	62
2.2	Echelles temporelles correspondant à des nombres d'onde différents	73
2.3	Echelles temporelles correspondant à des nombres d'onde différents	74
2.4	Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda} = 65$	82
2.5	Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda} = 94. \dots \dots \dots \dots \dots$	82
2.6	Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda} = 135.$	82
2.7	Rapport entre l'échelle de temps Lagrangienne et l'échelle temporelle des gros tourbillons	83
2.8	Temps de calcul.	84
3.1	calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 65$	95
3.2	calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 94$	95
3.3	calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 135$	95
4.1	Echelle intégrale temporelle Lagrangienne obtenue par intégration des corrélat de vitesse dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement sta- tionnaire. 'CH-L' modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur; 'C-SH' modèle	ions

de sous-maille de Cui-Shao; 'Sto.' indique le modèle stochastique Lagrang-

4.2	Echelle intégrale temporelle issue du modèle dans une turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 65$. $T_L(M)$ est la valeur modélisée par l'équation (3.57); k représente l'énergie cinétique et ϵ est le taux de dissipation
4.3	Echelle intégrale temporelle obtenue par le modèle en turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 94$
4.4	Echelle intégrale temporelle obtenue par le modèle en turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 135125$
4.5	Echelle intégrale temporelle en turbulence homogène isotrope et station- naire. T_L (I) indique le résultat de l'intégration de la corrélation; T_L (M), celui du modèle
4.6	Rapport entre l'échelle de temps Lagrangienne et l'échelle temporelle des grandes structures
4.7	Echelle intégrale temporelle Lagrangienne obtenue par intégration de la corrélation de vitesse en turbulence homogène isotrope en décroissance 124
5.1	Résultats de Donzis [3] par DNS
5.2	Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 40$
5.3	Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 90$
5.4	Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 130 \dots \dots$
5.5	Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 230 \dots \dots$
5.6	Epaisseur de la dispersion du scalaire dans l'expérience de Huq et Britter 140
5.7	Condition initiale de la simulation dans le cas de la turbulence inhomogène. 161
5.8	Trois positions d'observation dans l'expérience de Zhang
5.9	Paramètres de l'expérience de Zhang. $t = T1$
5.10	Comparaison des paramètres importants entre l'expérience et simulation numérique

Notations

Symbole	Unité	Définition
a	—	coefficient dans le modèle de Langevin
b	$m^2 s^{-2}$	coefficient dans le modèle de Langevin
b_{ij}	$m \ s^{-1}$	coefficient du terme aléatoire intervenant dans le modèle
		stochastique
$c^{'}$	$g m^{-3}$	fluctuation de concentration
С	$g m^{-3}$	concentration du scalaire
C_{dif}	_	rapport entre les deux temps caractéristique
C_{ϵ}	_	coefficient de dissipation dans le modèle de sous-maille
C_k	_	coefficient d'énergie cinétique turbulente dans le modèle
		de sous-maille
C_0	_	constante dans le modèle de T_L
D_E	$m^2 s^{-2}$	fonction de structure temporelle Eulérienne
D_L	$m^2 s^{-2}$	fonction de structure temporelle Lagrangienne
D_{ll}	$m^2 s^{-2}$	fonction de structure spatiale
E	$m^3 s^{-2}$	spectre d'énergie
E_{sa}	$m^2 s^{-2}$	énergie cinétique de sous-maille
f	$m \ kq \ s^{-2}$	force aléatoire
q_{ii}	$m \ s^{-2}$	tenseur de la partie déterministe du modèle stochastique
50		lagrangien
H	m	épaisseur de la couche de mélange
k	$m^2 s^{-2}$	énergie cinétique turbulente
k	s^{-1}	nombre d'onde dans l'espace spectral
k_{c}	s^{-1}	nombre d'onde de coupure en LES
$\vec{k_c}$	s^{-1}	nombre d'onde de Kolmogorov
kmar	s^{-1}	maximum du spectre d'énergie cinétique
k_{min}	s^{-1}	minimum du spectre d'énergie cinétique
K_0	_	constante de Kolmogorov dans le spectre d'énergie
Ľ	m	échelle caractéristique des gros tourbillons
L	m	longueur de la boîte de simulation numérique
M_{f}	kq	masse des molécules du fluide
M_n	ka	masse d'une particule
$\overset{\scriptscriptstyle P}{N}$	_	nombre de noeuds dans la simulation
N_n	_	nombre total de particules dans le domaine d'étude
q^{ν}	$m^2 s^{-2}$	énergie cinétique de la turbulence

Symbole	Unité	Définition
R^E	_	rapport eulérien entre le temps de décroissance de
		vitesse et de scalaire
R^L	_	rapport lagrangien entre le temps de décroissance de
		vitesse et de scalaire
Re_L	_	nombre de Reynolds basé sur l'échelle des gros tourbil-
_		lons L
R_{uu}	_	corrélation de la vitesse eulérienne
R_{vv}	_	corrélation de la vitesse lagrangienne
Re_{λ}	_	nombre de Reynolds basé sur l'échelle de dissipation λ
Re_{Λ}	_	nombre de Revnolds basé sur l'échelle intégrale longitu-
11		dinale Λ
Re_n	_	nombre de Revnolds basé sur l'échelle de Kolmogorov n
S_c	_	nombre de Schmidt
S_{ii}	s^{-1}	taux de déformation de l'écoulement
S_k	_	skewness de la vitesse
t	S	temps réel
T_C	S	temps de convection
T_D	S	temps de diffusion
T_{dif}	S	temps de diffusion de scalaire
T_E	S	temps intégral eulérien de la vitesse
$\overline{T_{k_i}}$	S	temps intégral pour les nombres d'onde différents
T_L	S	échelle de temps intégrale de la vitesse lagrangienne
T_{r}^{\geq}	S	échelle de temps intégrale de la vitesse lagrangienne des
L		petites échelles
T_R	S	temps de rotation
T_{S}	S	temps de díormation
$T_{\lambda}^{\tilde{b}}$	S	échelle de temps de dissipation
T_{Λ}	S	échelle de temps intégrale basée sur l'échelle intégrale
- 11		longitudinale
u_i	$m \ s^{-1}$	la composante de la vitesse eulérienne
u_{max}	$m \ s^{-1}$	maximum de la vitesse
v_i	$m \ s^{-1}$	la composante de la vitesse lagrangienne
x_i	m	coordonnée longitudinale
x_0	m	la composante longitudinale de la position initiale de
0		particule
x_p	m	position de particule
X	m	la dispersion des particules
y_i	m	coordonnée transversale
y_0	m	la composante transversale de la position initiale de par-
		ticule
Y	m	déplacement des particules
z_i	m	coordonnée verticale
z_0	m	la composante verticale de la position initiale de partic-
		ule

_

Symbole	Unité	Définition
α	_	constante dans le modèle de Kaneda pour l'échelle intégrale temporelle lagrangienne en temps court
α_{ij}	s^{-1}	coefficient intervenant dans le modèle stochastique
$lpha_k$	-	nombre aléatoire pour la génération de la turbulence
eta_{ij}	$m \ s^{-1}$	coefficient aléatoire intervenant dans le modèle stochas-
_		tique
β_k	_	nombre aléatoire pour la génération de la turbulence
δ_{ij}	_	symbole de KRÖNEKER ($\delta_{ij} = 1 \text{ si } i = 1 \text{ et } \delta_{ij} = 0 \text{ sinon}$)
Δ	m	longueur caractéristique de maille de grille
Δt	m	intervalle de temps
Δx	m	taille des mailles dans la direction x
Δy	m	taille des mailles dans la direction y
Δz	m	taille des mailles dans la direction z
ϵ_{ijk}	— 0 2	symbole de LEVI CIVITA
ε	$m^{2} s^{-3}$	dissipation turbulente
$\varepsilon^{>}$	$m^2 \ s^{-3}$	dissipation turbulente des petites échelles
η	m	échelle de Kolmogorov
$ heta_1$	—	nombre aléatoire uniformément distribué dans
0		l'intervalle $[0, 2\pi]$
θ_2	—	nombre aléatoire uniformément distribué dans
	9	l'intervalle $[0, 2\pi]$
κ	$m^{2/8}$	coefficient de diffusivité de scalaire
λ	m	échelle de dissipation
Λ	$m_{2 - 1}$	échelle intégrale longitudinale
ν	$m^2 s^{-1}$	viscosité cinématique du fluide
ν_t	$m^2 s^{-1}$	viscosité turbulente
$\frac{\phi}{\tau}$	—	scalaire
ϕ	—	valeur moyenne au sens des statistiques de Reynolds de
11		la grandeur ϕ
ϕ	_	fluctuation instantane par rapport a la valeur moyenne
171		ou a la valeur filtree de la grandeur ϕ
$ \varphi $	— 	norme de la grandeur φ
σ	$m s^{-1}$	ecart-type de la vitesse
σ_E	$m \ s^{-1}$	ecart-type de la vitesse eulerienne
σ_L	$m s^{-1}$	écart type de la vitesse lagrangienne
$\sigma_{u^{<}}$	$m s^{-1}$	ecart-type de la vitesse des grandes échelles
σ_{u} >	$m s^{-2}$	ecart-type de la vitesse des petites échelles
$ au_{ij}$	$m^2 s^2$	tenseur des contraintes sous-maille
$ au_\eta$	S	temps caracteristique de Kolmogorov
$ au_{\lambda}$	s	temps caracteristique de dissipation
ξ	—	variable aleatoire comprise entre -1 et 1

Introduction

Contexte et origine de cette recherche

Le travail de cette thèse se situe dans le domaine de l'étude du mélange et de la dispersion par le mouvement turbulent. La compréhension des processus de mélange dans un écoulement turbulent est nécessaire pour de nombreuses applications pratiques telles que les phénomènes de dispersion d'un polluant dans l'atmosphère ou dans l'océan, la chimie et la combustion, etc. Pour ce faire, il nous faut donc d'abord bien connaître le mouvement turbulent du fluide. On sait que le mouvement de la turbulence présente un processus aléatoire en déséquilibre, ayant des structures à la fois ordonnées et désordonnées, dont la gamme d'échelles spatio-temporelle peut être très large. La difficulté majeure dans l'étude de la turbulence, est due à la non-linéarité des équations gouvernantes. Ces équations ne peuvent pas être résolues de manière analytique, à cause du manque d'outils mathématiques. Ainsi pour des besoins d'applications pratiques, on est amené à construire des modèles physiques simplifiés. Sur le plan de la modélisation, il existe une multitude de modèles pour des écoulements complexes. Cela montre la complexité de la turbulence et la recherche dans ce domaine est en plein essor de développement. Pour les problèmes de mélange ou de dispersion turbulent, la modélisation statistique classique n'est plus satisfaisante, car le problème physique (mélange ou dispersion) est fortement liée aux caractères instationnaires et aux tourbillons de la turbulence instantané.

Depuis une trentaine d'années, grâce au développement rapide de gros ordinateurs, un nouvel outil d'étude a vu le jour: la simulation directe (DNS). Cette technique permet d'obtenir une description complète et instantanée du mouvement turbulent. Néanmoins, une turbulence réelle présente généralement un nombre de Reynolds très grand qui donne une gamme d'échelles de tourbillons très étendue. Si L est l'échelle intégrale (la plus grande), caractérise les structures ou tourbillons porteurs de l'énergie cinétique et l'autre échelle η , dite de Kolmogorov (la plus petite), caractérise les structures dissipatives, c'est-à-dire les structures qui assurent la dissipation par viscosité moléculaire. Le rapport de ces deux échelles est directement lié à l'une des caractéristiques essentielles de la turbulence, le nombre de Reynolds turbulent, Re_L , basé sur l'échelle L:

$$\frac{L}{\eta} = (Re_L)^{3/4} \tag{1}$$

Le nombre de noeuds pour la résolution complète de l'équation de Navier-Stokes est environ égal à:

$$N = \left(\frac{L}{\eta}\right)^3 = (Re_L)^{9/4} \tag{2}$$

Cette méthode devient vite impossible à mettre en oeuvre dès que l'on augmente le

nombre de Reynolds (Re).

Pour s'affranchir de cette limitation du nombre de Reynolds, une autre technique hybride, appelée simulation des grandes échelles (SGE, LES en anglais), est ainsi développée. En LES, le champ de vitesse est considéré suivant la taille des tourbillons à l'aide d'un filtre. On résout directement les équations qui gouvernent les grosses structures. L'effet des petites structures est pris en compte par un modèle, dit de sous-maille. Cette technique nous offre la possibilité de connaître en détail les grandes structures turbulentes de la vitesse. Les actions des structures de sous-maille sont généralement modélisées à travers une viscosité turbulente.

Cependant, pour des problèmes de mélange ou de dispersion d'une espèce dans un milieu turbulent, une connaissance détaillée des grosses structures du champ de vitesse turbulente n'est pas suffisante. Le mélange peut se produire à des échelles dont la taille dépend de la diffusivité moléculaire de l'espèce, ou du nombre sans dimension de Schmidt (Sc). On sait que pour le mélange turbulent de différentes matières ainsi que la réaction chimique, le nombre de Schmidt (Sc) dans certains cas peut être très grand, l'influence des petites structures sur la réaction peut être beaucoup plus importante que celle des grandes structures. Dans cette situation, une LES classique n'est pas en mesure de bien prendre en compte le phénomène physique. Des modèles physiques supplémentaires sont alors nécessaires si l'on veut une prédiction correcte de mélange des espèces. En méthode Eulériennes, on peut citer par exemple les modèles qui consistent à reconstruire la densité de probabilité de sous-maille des espèces, à partir des quantités fournies par les grosses structures.

Dans cette thèse, nous nous plaçons dans le cadre d'une approche mixte : méthode Eulérienne pour le champ de vitesse des grandes échelles et Lagrangienne pour le champ des espèces. Nous considérons le champ de vitesse turbulente comme un fluide porteur, le mélange d'espèce est traité par le suivi Lagrangien des trajectoires des particules fluides porteuses de concentration. A partir du champ de vitesse Eulérienne des grandes échelles, fourni par LES en tout point du maillage numérique, un champ de vitesse Lagrangien est reconstitué en tout point de la trajectoire d'une particule fluide par une méthode d'interpolation. Dans le but de tenir compte de l'action des structures de sous-maille, par analogie à la modélisation stochastique classique que l'on utilise en description statistique, une fluctuation de vitesse en sous-maille est introduite en utilisant une équation stochastique de Langevin. Cette modélisation sera ensuite testée dans le cadre de l'étude de diffusion Lagrangienne d'un scalaire passif, dans une turbulence homogène isotrope, et dans une turbulence inhomogène sans cisaillement.

Les objectifs de travail

Les objectifs de ce travail de recherche sont:

- La prise en compte du caractère aléatoire des fluctuations de sous-maille dans la méthode de simulation des grandes échelles par la construction d'un modèle de sous-maille,

physique, stochastique pour l'approche Lagrangienne de la dispersion des particules dans l'écoulement turbulent;

- L'étude de l'influence sur le mélange, des corrélations de vitesse Lagrangienne et des échelles intégrales temporelles dans un écoulement turbulent par les simulations numériques directes et par les simulations des grandes échelles avec ou sans la modélisation stochastique des fluctuations de vitesse de sous-maille.

- L'application de la simulation des grandes échelles couplées avec la modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille à l'étude de la diffusion Lagrangienne de scalaire passif dans le cas d'une turbulence homogène et une turbulence inhomogène.

- La prise en compte de l'effet du nombre de Schmidt (Sc) dans le processus de mélange à travers un modèle d'échange entre les particules fluides porteuses de différentes concentrations.

Nous nous plaçons dans le cadre d'une turbulence, homogène isotrope ou inhomogène, stationnaire ou non-stationnaire. Nous lançons les particules, et puis nous suivons ces particules fluides dans leurs mouvements, c'est-à-dire nous calculons à chaque instant, la position et la vitesse correspondante de la particule fluide par une méthode précise d'interpolation. Nous évaluons ensuite, les quantités statistiques pertinentes telle que la fonction de corrélation en deux temps de vitesse. Ces fonctions de corrélations, permettent d'obtenir les temps de corrélation Lagrangiennes qui ont un rôle très important pour la dispersion ou le mélange turbulent de scalaire passif avec ou sans réaction chimique. Nous examinerons ensuite la modélisation stochastique de vitesse de sous-maille dans deux cas de diffusion d'un scalaire passif:

- dans une turbulence homogène isotrope (l'expérience de Huq et Britter [4]);
- dans une turbulence inhomogène simple (couche de mélange sans cisaillement, l'expérience de Zhang X.H. [1,2]).

La construction de cette thèse

Dans cette thèse, tout d'abord, nous introduirons la notion de la turbulence, les équations de base de Navier-Stokes, les méthodes de simulation numérique et la méthode de suivi Lagrangien des particules marquées. On présentera ensuite des simulations numériques réalisées. Et puis, nous discuterons les résultats obtenus et nous ferons une comparaison avec des résultats existants de la littérature. A la fin, nous exposerons les perspectives futures de ce travail.

• Dans le premier chapitre de ce rapport nous allons décrire les équations de bases, la simulation directe (DNS) et les modèles de sous-maille pour les simulations des grandes échelles (LES), les méthodes de suivi des particules fluides dans l'écoulement turbulent.

- Le deuxième chapitre est dédié à la simulation directe (DNS) et la simulation des grandes échelles (LES) pour le suivi des particules fluides. Les corrélations de vitesse et les échelles intégrales temporelles seront présentées.
- Afin d'améliorer la résolution de vitesse Lagrangienne en LES et bien suivre le mouvement des particules, nous allons nous intéresser dans le troisième chapitre à la modélisation stochastique de sous-maille. Le système d'équations qui résout la cinématique des particules fluides dans l'écoulement selon les hypothèses données pour la turbulence sera proposé en suivant une analogie avec la théorie du mouvement *brownien*. Nous allons présenter le modèle classique de Langevin et différents types de variantes.
- Le quatrième chapitre permet d'approfondir les corrélations et les échelles intégrales. Nous allons faire des comparaisons des résultats de la DNS, la LES et la LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille. Nous comparons les résultats pour les différents modèles de sous-maille, modèle de Chollet-Lesieur et celui de Cui-Shao.
- Nous recherchons la diffusion Lagrangienne de scalaire passif dans une turbulence homogène et isotrope et une turbulence inhomogène dans le cinquième chapitre, et nous comparons les résultats avec les expériences de Huq [4] et de Zhang [1,2].
- A la fin, nous présentons une conclusion de ce travail de recherche et discutons les voies de recherche à venir.

Chapitre 1

Equations de base et méthode numérique

1.1 Notions principales

La turbulence est un phénomène qui existe dans la nature, par exemple dans le mouvement de l'air sur les surfaces des objets volants, dans le processus de transport de la matière et de la quantité de chaleur. Mais la complexité des phénomènes liés à la turbulence fait de leur maîtrise totale un objectif lointain.

Compte tenu du développement scientifique et technologique, la recherche scientifique sur la turbulence devient une discipline importante. Et, pour répondre aux besoins de l'industrie, diverses méthodes et techniques de recherche (théoriques, numériques, expérimentales) ont été développées. On peut citer par exemple la simulation numérique directe par ordinateurs qui fournit les détails de la turbulence; les mesures directes dans les écoulements turbulents par l'anémométrie à fil chaud, qui fournit les fluctuations de vitesse et les fluctuations de température en un point; la méthode de PIV combinée avec l'analyse d'images fournissant des cartes instantanées des vecteurs de vitesse dans tout un plan du champ turbulent. Sur le plan de la modélisation statistique, il existe une multitude de modèles pour des écoulements complexes. Cela montre la complexité de la turbulence et que la recherche dans ce domaine est en plein essor de développement.

1.2 Equations de base

Hypothèse de milieu continu

On se situe dans le cadre d'un milieu continu macroscopique. C'est-à-dire que les échelles spatio-temporelles de la turbulence sont plus grandes que celles de mouvement aléatoire des molécules. Dans notre recherche en turbulence, on considère le mouvement d'une particule fluide (un ensemble de molécules) et non pas seulement une molécule particulière.

1.2.1 Turbulence homogène et turbulence isotrope

- Un champ turbulent est dit homogène si toutes les corrélations statistiques sont invariantes par translation:

$$\langle u_i(x_1,t) \, u_j(x_2,t) \, \cdots \, u_k(x_n,t) \rangle = \langle u_i(x_1+L,t) \, u_j(x_2+L,t) \, \cdots \, u_k(x_n+L,t) \rangle \tag{1.1}$$

- Un champ turbulent est dit isotrope si ses corrélations ne dépendent plus de la direction (invariance par rotation par rapport à un axe et par symétrie par rapport à un plan). Dans ce cas, on a également:

$$\langle u_1^2 \rangle = \langle u_2^2 \rangle = \langle u_3^2 \rangle = \frac{2}{3}k$$
 (1.2)

où k est l'énergie cinétique turbulente.

1.2.2 Equations dans l'espace physique

Si la turbulence est incompressible, on peut écrire:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1.3}$$

Les écoulements turbulents de fluides Newtonien peuvent plus généralement être décrits par les équations de Navier-Stokes:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \end{cases}$$
(1.4)

où u_i est la vitesse dans la direction i, p la pression stationnaire, ρ la masse volumique et ν la viscosité cinématique.

Comme on se focalise seulement sur la situation incompressible dans ce travail, les équations de Navier-Stokes peuvent donc être ré-écrites sous la forme:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j}$$
(1.5)

Décomposition de Reynolds

Dans la description statistique de la turbulence, on cherche, d'une part, à décrire l'évolution des champs moyens et fluctuants, et d'autre part, à mettre en évidence les termes d'interaction entre ces deux champs.

La décomposition de Reynolds est:

$$u_{i}(\mathbf{x},t) = \langle u_{i}(\mathbf{x},t) \rangle + u_{i}^{'}(\mathbf{x},t)$$
(1.6)

où u_i est la vitesse totale en direction i, et $\langle u_i \rangle$ la moyenne de vitesse, u'_i la fluctuation.

Dans ce travail, on reste dans des turbulences simples, de type homogène ou inhomogène sans cisaillement moyen, et on n'étudie que les caractères de fluctuation turbulente. La vitesse moyenne est ainsi considérée comme nulle en tous moments. Dans la suite, on ne considère que la fluctuation de vitesse.

$$\langle u_i(\mathbf{x},t) \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad u_i(\mathbf{x},t) = u'_i(\mathbf{x},t)$$

1.2.3 Equations dans l'espace spectral

Parmi les méthodes numériques employées pour la résolution de la partie spatiale des équations aux dérivées partielles, les méthodes Différences Finies (DF) et les méthodes Elément Finis (EF), "méthodes locales", utilisent des informations locales dans l'espace physique; en revanche, les méthodes spectrales sont des "méthodes globales" dans l'espace

spectral, au sens où elles utilisent pour la plupart, des polynômes d'ordre élevé ou des séries de Fourier.

Dans les contextes adaptés, les méthodes spectrales présentent une précision inégalée par les méthodes locales, à nombre de points équivalent. De plus, lors de calculs sur des grands domaines dans le cas ou le nombre de Reynolds est élevé, les méthodes spectrales ont l'avantage de permettre l'utilisation d'un maillage plus grossier. Mais ces méthodes spectrales ne sont pas toujours valables et adaptées, surtout pour les cas de domaines irréguliers ou de frontières compliquées (parois, etc.).

Dans ce travail, le domaine physique pour nos simulations numériques se limite à une boîte cubique, et les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire il n'y a pas de frontière réelle. De plus, nous voulons utiliser les simulations numériques directes qui demandent une précision élevée. La méthode spectrale est bien adaptée à ce type de problème et sera la méthode numérique choisie pour cette thèse.

Transformée de Fourier

Les transformées de Fourier sont très fréquemment utilisées en turbulence, et elles permettent d'analyser la turbulence en terme de différentes échelles. On les appelle en général "analyse spectrale". En effet, elles sont utiles tant du point de vue de l'algorithme de résolution (dans le cas de la simulation numérique spectrale), que de l'analyse physique des champs turbulents.

On rappelle ici la définition de la transformée de Fourier en trois dimensions:

$$\widehat{u}_i(\mathbf{k},t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} u_i(\mathbf{x},t) \, e^{-i(\mathbf{x}\cdot\mathbf{k})} \, d\mathbf{x} \tag{1.7}$$

$$u_i(\mathbf{x},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{u}_i(\mathbf{k},t) \, e^{i(\mathbf{x}\cdot\mathbf{k})} \, d\mathbf{k}$$
(1.8)

où $u_i(\mathbf{x}, t)$ est la vitesse dans l'espace physique, et $\hat{u}_i(\mathbf{k}, t)$ son correspondant dans l'espace spectral.

On applique la Transformée de Fourier à l'équation de conservation de masse:

$$k_i u_i(\mathbf{k}) = 0 \tag{1.9}$$

et à l'équation de Navier-Stokes:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\nu k^2\right)\,\widehat{u}_i(\mathbf{k}) = T_i(\mathbf{k}) \tag{1.10}$$

où le terme non-linéaire $T_i(\mathbf{k})$ est de la forme :

$$T_i(\mathbf{k}) = M_{ijm}(\mathbf{k}) \int \int \widehat{u}_j(\mathbf{p}) \widehat{u}_m(\mathbf{q}) \,\delta(\mathbf{k}-\mathbf{p}-\mathbf{q}) d^3\mathbf{p} \, d^3\mathbf{q}$$
(1.11)

avec

$$M_{ijm}(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2} \left[k_m P_{ij}(\mathbf{k}) + k_j P_{im}(\mathbf{k}) \right]$$
(1.12)

où δ est le symbole de Kronecker et $P_{ij}(\mathbf{k})$ est l'opérateur de projection sur le plan orthogonal au vecteur \mathbf{k} .

$$P_{ij}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \tag{1.13}$$

Transformée de Fourier en forme discrète

Dans la simulation numérique, on utilise, en fait, la transformée de Fourier en forme discrète. Le nombre d'onde k_i dans l'espace spectral est défini par:

$$k_i = \frac{2\pi}{L}i\tag{1.14}$$

où L est la longueur de la boîte, et i un nombre entier tel que:

$$-\frac{N}{2} \le i \le \frac{N}{2} - 1 \tag{1.15}$$

N est le nombre de mailles dans une direction, et les valeurs minimale et maximale des nombres d'onde sont:

$$k_{min} = \frac{2\pi}{L}, \quad k_{max} = \frac{2\pi}{L} \frac{N}{2}$$
 (1.16)

Le code JMFFT

Dans nos simulations, nous avons utilisé la transformée de Fourier rapide (FFT pour Fast Fourier Transform) dans la résolution complète des équations de la mécanique des fluides. Le code **JMFFT**, version 8.0, est développé par l'IDRIS. Il est bien compatible avec le calculateur **NEC_SX5**.

1.3 Méthodes de simulation numérique

1.3.1 Introduction

La mécanique des fluides numérique, c'est-à-dire l'étude des écoulements de fluide par la simulation numérique, est une discipline en plein essor. La qualité des informations fournies par la simulation numérique est subordonnée au niveau de résolution choisi: pour obtenir la meilleure précision possible, la simulation doit tenir compte de toutes les échelles spatio-temporelles qui contribuent à la dynamique de l'écoulement.

La simulation numérique, directe ou faisant appel à l'utilisation d'un modèle statistique, prend son essor au début des années 1960. Cette évolution est directement liée au progrès de l'informatique et des gros calculateurs scientifiques. Dans les années 70, les gros ordinateurs permettaient déjà de simuler sans modèle statistique (simulation directe), les mouvements de la turbulence isotrope homogène pour des petits nombres de Reynolds.

En complément de l'expérimentation de soufflerie, la simulation numérique est devenue une méthode très pratique. Elle permet aussi de valider les modèles de turbulence employés pour la simulation des écoulements turbulents complexes: ces simulations constituent des expériences numériques de référence. La simulation numérique peut également résoudre des problèmes dont les conditions limites ou les conditions initiales ne peuvent pas, ou difficilement, être reproduites par les expériences de soufflerie.

Suivant le type de modèle utilisé, on peut classer les simulations numériques en 3 catégories:

• RANS (Simulation utilisant les équations moyennées, au sens de décomposition de Reynolds, Reynolds average Navier-Stokes en anglais)

Cette méthode utilise des modèles statistiques pour fermer les termes inconnus des équations de Navier-Stokes moyennées. Elle n'est pas universelle, elle a besoin d'informations sur la configuration géométrique de l'écoulement, c'est-à-dire que l'on doit développer les modèles différents pour des cas variés. Il faut ainsi souvent corriger les coefficients des modèles en fonction du cas physique considéré.

• DNS(Simulation Numérique Directe, Direct Numerical Simulation (DNS) en anglais)

Cette simulation n'a besoin d'aucun modèle, elle résout complètement l'équation de Navier-Stokes. Cette technique, relativement récente, est en plein essor de développement. Elle nous offre une résolution précise, qui nous permet d'obtenir tous les détails du champ de vitesse. Mais elle est limitée aux nombres de Reynolds petits.

• LES(Simulation des Grandes Echelles, Large Eddy Simulation (LES) en anglais) Cette technique, se propose de ne calculer directement que les grandes échelles de l'écoulement, et l'action des petites échelles doit être modélisée. Elle offre la possibilité de connaître en détail les grandes structures turbulentes de la vitesse. Elle permet d'atteindre les écoulements, turbulents à grand nombre de Reynolds. Mais elle ne permet pas de traiter des phénomènes qui se passent dans les petites échelles non-simulées.

1.3.2 Simulation numérique directe : DNS

L'ambition de la DNS est de calculer toutes les échelles constituant le spectre de l'énergie cinétique turbulente, et elle consiste à résoudre aussi précisément que possible les équations complètes de la mécanique des fluides. L'avantage de la DNS est l'obtention en détail de toutes les informations de la turbulence. En même temps, la DNS permet de comprendre la dynamique de la turbulence et d'évaluer beaucoup de quantités inaccessibles expérimentalement: par exemple, la pression fluctuante.

La résolution des équations de Navier-Stokes implique, si l'on désire assurer une qualité maximale du résultat, de prendre en compte la dynamique de toutes les échelles spatiotemporelles de la solution. Pour représenter numériquement la totalité de ces échelles, spatiale et temporelle, il est nécessaire que les discrétisations soient suffisamment fines, c'est-à-dire que les pas de discrétisation en espace Δx et en temps Δt de la simulation soient respectivement plus petits que la longueur caractéristique et le temps caractéristique associés à la plus petite échelle dynamiquement active de la solution exacte.

A mesure que se développe la capacité de l'ordinateur, la DNS devient alors un outil indispensable dans la recherche de la turbulence. Aujourd'hui, on est capable en DNS, d'atteindre un nombre de Reynolds basé sur l'échelle dissipative de Taylor de l'ordre de 1200. Donzis [3] a déjà fait la simulation directe en cube de 1024^3 , pour un nombre de Reynolds $Re_{\lambda} = 390$. Kaneda [5] a fait la DNS pour une turbulence homogène et isotrope stationnaire dans une boîte cubique, avec un nombre de noeuds de 2048^3 et 4096^3 , et le nombre de Reynolds Re_{λ} atteint 1200. Néanmoins, la plupart des écoulements industriels ont un nombre de Reynolds ($Re \geq 10^5$), hors d'atteinte des capacités informatiques actuelles. La DNS n'est pas ainsi toujours capable de bien réaliser l'objectif fixé.

La condition physique de précision en DNS

Pour bien assurer la précision de simulation DNS, il faut bien simuler le comportement des échelles de taille différente, en général au moins jusqu'à l'échelle de Kolmogorov η :

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \tag{1.17}$$

où ν est la viscosité du fluide, et ϵ le taux de dissipation de la turbulence.

Eswaran [6] nous donne une condition pour assurer la précision de la résolution en DNS:

$$\eta k_{max} \ge 1 \tag{1.18}$$

Dans ce travail, toutes les simulations DNS sont bien en accord avec ce critère.

Grandeurs caractéristiques dans l'espace spectral

L'énergie cinétique de la turbulence est calculée dans l'espace spectral:

$$q^2 = \int_0^\infty E(k) \, dk \tag{1.19}$$

où E(k) (le spectre d'énergie) est l'énergie moyenne par unité de masse dans une bande de fréquence spatiale $[k, k + \delta k]$. Selon la théorie de Kolmogorov [7] pour une turbulence isotrope stationnaire, on trouve alors:

$$E(k) = C_k \,\epsilon^{2/3} \,k^{-5/3} \tag{1.20}$$

où C_k est une constante, elle a une valeur de $1.4 \sim 1.6$.

Le taux de dissipation d'énergie ϵ dans l'espace spectral peut être calculé sous la forme:

$$\epsilon = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k) \, dk \tag{1.21}$$

Méthode pseudo spectrale

La méthode pseudo-spectrale consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes dans l'espace spectral en évaluant le terme non-linéaire dans l'espace physique. Elle est plus utilisée pour des écoulements turbulents dont le domaine présente des conditions limites périodiques. Pour des écoulements simples tels que la turbulence homogène isotrope, cette méthode est parfaitement adaptée.

L'objectif de mon travail consiste à rechercher des caractéristiques fondamentales de la turbulence. On a choisi un cube de turbulence avec une condition limite périodique dans les trois directions. En utilisant la transformée de Fourier rapide (FFT pour Fast Fourier Transform), le terme non-linéaire $u_i u_i$ est calculé dans l'espace physique.

1.3.3 Simulation des grandes échelles : LES

Il est bien connu que dans la pratique, par exemple pour des problèmes de prédiction environnementale, la résolution complète et directe des équations gouvernant la mécanique des fluides est impossible, à cause de la très large gamme d'échelles spatiales générée par la turbulence à grand nombre de Reynolds. Nous avons donc besoin de méthodes numériques performantes et de modèles physiques adéquats. Au Laboratoire de Mécanique des Fluide et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon (LMFA, UMR CNRS 5509), depuis longtemps, des recherches sur le phénomène de la turbulence et de la dispersion atmosphérique sont entreprises.

La technique de la simulation numérique des grandes échelles est basée sur la décomposition des champs dynamiques instantanés de l'écoulement en deux parties par les structures tourbillonnaires de différentes tailles. Cette méthode nous demande de séparer les grandes échelles en les isolant par un filtrage des petites échelles.

Cette méthode se propose de ne calculer directement que les grandes échelles de l'écoulement, et l'action des petites échelles doit être modélisée. On appelle souvent les champs obtenus: "le champ résolu" et "le champ modélisé" respectivement. Les plus petites échelles, qui a priori ont un comportement se rapprochant de l'isotropie, sont modélisées, ce qui pose par conséquent un problème de fermeture à résoudre.

On considère néanmoins que cette méthode est largement plus précise que les modèles statistiques basés sur la décomposition de Reynolds (RANS). En effet, on considère que l'essentiel de la dynamique du champ est pris en compte au niveau des tourbillons qui sont résolus et que les petites échelles peuvent s'accommoder d'une description plus sommaire.

On sait que la dynamique du champ turbulent est essentiellement gouvernée par les grands tourbillons, les petites échelles s'adaptant au flux d'énergie qui provient des grandes. Une fois les petites échelles modélisées, la simulation des grandes échelles s'affranchit en partie seulement, de la limitation en nombre de Reynolds. La plupart des modèles de sous-maille sont d'ailleurs basés sur un concept de zone inertielle infinie, ils supposent un nombre de Reynolds tendant vers l'infini.

La LES est une technique récente. Elle permet de capturer la dynamique des structures des grandes échelles en prenant en compte les petits tourbillons par un modèle. Elle commence à être utilisée pour des problèmes industriels. Par exemple, elle permet de simuler la pression sur les ailes d'avion. Mais concernant le mélange ou la dispersion, toute la gamme d'échelles de la turbulence peut avoir son importance. Selon le nombre de Schmidt des constituants, le mélange turbulent peut avoir lieu dans de grandes ou dans de petites échelles. Si le nombre de Schmidt est grand, le phénomène se passe essentiellement dans des petites échelles, ce qui est ignoré par la LES. Ce manque de petites échelles est traduit, en outre, par une mauvaise qualité de la corrélation (Eulérienne et Lagrangienne) en deux temps en simulation des grandes échelles.

La méthode de filtrage

La première étape à définir pour la LES est le filtrage, qui sépare les échelles que l'on résout explicitement soit dans l'espace physique, soit dans l'espace spectral, de celles qui doivent être modélisées.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \mathbf{u}^{<}(\mathbf{x},t) + \mathbf{u}^{>}(\mathbf{x},t)$$
(1.22)

où, **x** repère un point dans l'espace physique; $\mathbf{u}^{<}$ est la variable de grandes échelles; $\mathbf{u}^{>}$ pour les petites échelles. Le champ filtré est défini par un produit de convolution dans l'espace physique par l'équation 1.23:

$$\mathbf{u}^{<}(\mathbf{x},t) = \int \mathbf{u}(\mathbf{x}')G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')d\mathbf{x}'$$
(1.23)

 $G(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ représente la fonction filtre. De façon générale, il y a trois filtrages spatiaux (Sagaut [8]): le filtre de boîte, le filtre Gausien et le filtre porte (Top-Hat en anglais). Le filtre dépend de méthode numérique utilisée. Dans l'espace spectral, le filtrage est donné par l'équation (1.24):

$$\widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t) = \widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t)\widehat{G}(\mathbf{k}) \tag{1.24}$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde.

Nous ne considérons que le filtre porte dans l'espace spectral, puisque la méthode numérique choisie est de type spectrale dans cette thèse. La forme correspondante de vitesse des grandes échelles est donc :

$$\widehat{\mathbf{u}}^{<}(\mathbf{k},t) = \begin{cases} \widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t) \ si \ | \mathbf{k} | \le k_c \\ 0 \ sinon. \end{cases}$$
(1.25)

où k_c est le nombre d'onde de coupure, il est définie par:

$$k_c = \frac{\pi}{\bigtriangleup}$$

où \triangle signifie la taille de filtre dans l'espace physique, et la vitesse de la partie des petites échelles est fournie par:

$$\widehat{\mathbf{u}}^{>}(\mathbf{k},t) = \widehat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t) - \widehat{\mathbf{u}}^{<}(\mathbf{k},t)$$
(1.26)

En LES, on ne résout que l'équation de Navier-Stokes en grandes échelles. Ainsi en écoulement incompressible, on résout les équations suivantes:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i^<}{\partial x_i} = 0\\ \frac{\partial u_i^<}{\partial t} + \frac{\partial u_i^< u_j^<}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p^<}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i^<}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \end{cases}$$
(1.27)

où τ_{ij} est le tenseur de tension de sous-maille:

$$\tau_{ij} = (u_i u_j)^< - u_i^< u_j^< \tag{1.28}$$

L'équation de Navier-Stockes est filtrée dans l'espace spectral terme par terme, et l'équation de la fluctuation de vitesse des grandes échelles devient alors:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\nu k^2\right) \,\widehat{\mathbf{u}}^<(\mathbf{k}, t) = \widehat{G}(\mathbf{k}) \,T_i(\mathbf{k}, t) \tag{1.29}$$

où le terme non-linéaire filtré $\widehat{G}(\mathbf{k}) T_i(\mathbf{k}, t)$ s'écrit :

$$\widehat{G}(\mathbf{k}) T_i(\mathbf{k}) = M_{ijm}(\mathbf{k}) \int \int \widehat{G}(\mathbf{k}) \,\widehat{u}_j(\mathbf{p}) \widehat{u}_m(\mathbf{q}) \,\delta(\mathbf{k}-\mathbf{p}-\mathbf{q}) d^3\mathbf{p} \,d^3\mathbf{q}$$
(1.30)

Le tenseur de sous-maille

Dans l'espace spectral, pour un filtre droit ayant une coupure à k_c et en l'absence de gradients moyens, l'équation de la vitesse des grandes échelles s'écrit en deux parties :

$$\frac{\partial \widehat{u}^{<}(\mathbf{k},t)}{\partial t} = -ik_{m}P_{ij}(\mathbf{k})\int_{p\leq k_{c}\ et\ q\leq k_{c}}\widehat{u}_{j}(\mathbf{p},t)\,\widehat{u}_{m}(\mathbf{q},t)\,\delta(-\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q})\,d^{3}p\,d^{3}q -\nu k^{2}\widehat{u}_{i}^{<}(\mathbf{k},t)+T_{i}^{>}(\mathbf{k},t)$$

$$(1.31)$$

où le terme de sous-maille $T_i^>(\mathbf{k}, t)$, est donné par:

$$T_i^{>}(\mathbf{k},t) = -ik_m P_{ij}(\mathbf{k}) \int_{p>k_c \text{ ou } q>k_c} \widehat{u}_j(\mathbf{p},t) \,\widehat{u}_m(\mathbf{q},t) \,\delta(-\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q}) \,d^3p \,d^3q \qquad (1.32)$$

le "ou" figurant dans la définition des bornes de l'intégrale, étant inclusif : c'est-à-dire signifiant p ou q supérieur à k_c , ou les deux supérieurs à k_c . Dans le cas où un seul nombre d'onde du couple p et q est supérieur à k_c on aura la contribution du terme croisé, qui met en jeu l'interaction entre les grandes et les petites échelles. Dans les cas où les deux seront supérieurs à k_c on aura la contribution du terme dit de vraie sous-maille, qui ne contient que les actions des petites échelles.

Le concept de viscosité turbulente et les modèles de sous-maille

Afin de modéliser les termes de sous-maille, la quasi-totalité des modèles existants fait appel au concept de viscosité turbulente. Les modèles se différencient en fait essentiellement par la manière de formuler cette viscosité turbulente, ou par la manière de compléter cette viscosité par un terme de nature différente.

Smagorinsky [9] est l'un des premiers qui a proposé un modèle à ce sujet. Dans les années suivantes, beaucoup de modèles ont été développés pour fermer cette équation. Dans l'équation de Navier-Stokes pour les grandes échelles (1.31), on introduit le concept de viscosité turbulente qui modélise le terme de sous-maille τ_{ij} :

$$\tau_{ij} = -2\nu_t S_{ij}^{<} \tag{1.33}$$

où $S_{ij}^{<}$ est le tenseur de déformation des échelles résolues :

$$S_{ij}^{<} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{<}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{<}}{\partial x_i} \right)$$
(1.34)

Dans l'espace spectral, cela consiste à remplacer $T_i^>(\mathbf{k}, t)$ par:

$$T_i^{>}(\mathbf{k},t) = -\nu_t \, k^2 \, \widehat{u}_i^{<}(\mathbf{k},t) \tag{1.35}$$

Notons qu'il s'agit ici d'une hypothèse de modélisation, le terme original donné par l'équation (1.31) n'ayant par exemple aucune raison d'être colinéaire à la fluctuation de vitesse. Il reste alors à exprimer le coefficient ν_t .

Afin d'analyser l'influence du modèle de sous-maille utilisé en LES, deux modèles de sous-maille sont retenus dans cette thèse: le modèle de Chollet-Lesieur [10] dans l'espace spectral et celui de Cui-Shao [11] dans l'espace physique. Ils sont utilisés séparément dans ce travail. Nous comparons ensuite les résultats qui viennent de ces deux modèles de sous-maille.

• Modèles de Chollet et Lesieur

Le modèle de sous-maille dans l'espace spectral le plus classique est celui proposé par Chollet et Lesieur (1981) [10] [12]. Ce modèle a été trouvé à partir des théories de fermeture en deux points et des travaux de Kraichnan (1976). Ce modèle, basé sur les résultats de l'analyse canonique (zone inertielle du spectre avec une pente en -5/3, filtre porte, pas d'effets associés à un spectre de type production), donne une expression de la viscosité effective en fonction du nombre d'onde considéré et du nombre d'onde de coupure. Il permet de rendre compte des effets locaux à la coupure, c'est-à-dire de l'augmentation du transfert d'énergie vers les échelles sous-maille. Le coefficient ν_t peut être écrit:
$$\nu_t = 0.267 \sqrt{\frac{E(k_c)}{k_c}} f\left(\frac{k_c}{k_\eta}\right) g\left(\frac{k}{k_c}\right)$$
(1.36)

où k_c est le nombre d'onde de coupure. $f\left(\frac{k_c}{k_\eta}\right)$ est une correction pour tenir compte de l'effet du nombre de Reynolds qui est bas dans cette zone:

$$f\left(\frac{k_c}{k_\eta}\right) = 1 - \left(\frac{k_c}{k_\eta}\right)^{4/3} \left(1 + \frac{1}{a} \ln\left(\frac{1 + a\left(\frac{k_c}{k_\eta}\right)^{-4/3}}{1 + a}\right)\right)$$
(1.37)

où a est une constante, qui est égale à $\frac{0.355\sqrt{4.5}}{2}$, et k_{η} le nombre d'onde de Kolmogorov qui est estimé en utilisant:

$$k_{\eta} = \frac{\pi}{\eta} \tag{1.38}$$

 $g\left(\frac{k}{k_c}\right)$ représente l'effet de "cusp" (accumulation d'énergie quand le nombre d'onde s'approche de la coupure, [12]):

$$g\left(\frac{k}{k_c}\right) = 1 + 1.7693 \left(\frac{k}{k_c}\right)^{0.372} \tag{1.39}$$

• Modèle de Cui-Shao

Le modèle de Cui-Shao [11], développé en collaboration entre l'Université de Tsinghua et le LMFA, est ensuite choisi dans ce travail. Ce modèle propose:

$$\nu_t = -\frac{S_k(\Delta)}{8} \Delta \sqrt{D_{ll}(\Delta)} \tag{1.40}$$

où le paramètre Δ est égale à la taille de maille, et S_k est le Skewness (coefficient de dissymétrie), défini par:

$$S_k(\Delta) = \frac{D_{lll}(\Delta)}{D_{ll}(\Delta)^{3/2}}$$
(1.41)

 $D_{lll}(\Delta)$ est la fonction de structure Eulérienne d'ordre 3, et $D_{ll}(\Delta)$ celle d'ordre 2:

$$D_{ll}(\Delta) = \langle (u_i(x + \Delta) - u_i(x))^2 \rangle$$
(1.42)

$$D_{lll}(\Delta) = \langle (u_i(x+\Delta) - u_i(x))^3 \rangle$$
(1.43)

Par rapport au modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, qui est local dans l'espace spectral, mais globalement uniforme dans tout le domaine de la turbulence, le modèle de Cui-Shao par construction, comprend les informations locales à la fois dans l'espace spectral et dans l'espace physique. On peut espérer ainsi qu'il est plus adapté à une turbulence inhomogène que celui de Chollet-Lesieur, car il garde un caractère local dans l'espace physique.

1.4 Description Eulérienne et Lagrangienne

1.4.1 Introduction

En général, il y a deux approches pour étudier le champ turbulent: l'approche Eulérienne et l'approche Lagrangienne. La première consiste à résoudre les équations qui gouvernent la turbulence en des points fixés, et s'applique plutôt aux cas ou l'on s'intéresse aux propriétés du champ liées aux positions spatiales; la second concerne l'analyse de la turbulence le long des trajectoires des particules fluides, et s'adapte mieux aux processus associés à l'évolution des particules de fluide avec le temps.

1.4.2 Description Eulérienne

Dans ce travail, on résout l'équation de Navier-Stokes par les simulations DNS et LES dans le cadre Eulérien. On obtient les informations sur le champ turbulent: la vitesse en des points fixés, l'énergie et la dissipation en statistique moyenne, etc. Dans ce paragraphe on va considérer certaines grandeurs Eulériennes caractéristiques du régime turbulent.

L'énergie cinétique de la turbulence

L'énergie cinétique moyenne de la turbulence est dans l'espace physique:

$$q^2 = \frac{1}{2} < u_i \, u_i > \tag{1.44}$$

et s'exprime dans l'espace spectral:

$$q^{2} = \int_{0}^{\infty} E(k) \, dk \tag{1.45}$$

En LES, on résout les équations de Navier-Stokes jusqu'à l'échelle de coupure Δ $(k_c = \frac{\pi}{\Delta})$. Et si le nombre d'onde de coupure k_c est suffisamment petit, l'essentiel de l'énergie de la turbulence se trouve dans les grandes échelles contenues dans le gamme $k \leq k_c$. On approxime cette grandeur caractéristique jusqu'à k_c par:

$$q^{2} = \int_{0}^{k_{c}} E(k) \, dk \tag{1.46}$$

Les écarts types de la vitesse

L'écart type de vitesse est donné par l'exprssion:

$$\sigma_{u_i} = \sqrt{\langle u_i^2 \rangle} \tag{1.47}$$

où $\langle \rangle$ indique la moyenne d'ensemble.

Pour un écoulement homogène isotrope statistiquement stationnaire, les écarts types de vitesse des trois directions (x, y, z) sont égaux:

$$\sigma_u = \sigma_v = \sigma_w \tag{1.48}$$

Pour une turbulence homogène isotrope, les écarts types de la vitesse Eulérienne sont égaux à ceux de la vitesse Lagrangienne, et on peut noter:

$$\sigma_L = \sigma_E \tag{1.49}$$

La dissipation d'énergie de la turbulence ϵ

Le taux de la dissipation d'énergie $\epsilon\,$ dans l'espace spectral peut être calculé sous la forme:

$$\epsilon = \int_0^\infty 2\nu k^2 E(k) \, dk \tag{1.50}$$

En DNS, on fait le calcul jusqu'au nombre d'onde k_{max} , normalement $k_{max} \ge k_{\eta}$, et

on peut dire que l'échelle de simulation est suffisamment petite et pour que la dissipation d'énergie turbulente soit bien calculée par l'intégration dans l'espace spectral.

Cependant, dans le cas de la LES, en effet, on n'a que les grandes échelles, les spectres se trouvent dans un intervalle de 0 à k_c , et k_c se trouve normalement dans la zone d'inertie, alors que la dissipation se situe dans la zone des petites échelles. L'équation (1.50) n'est plus valable et l'intégration n'est faite que jusqu'à k_c .

Avec l'hypothèse de grand nombre de Reynolds, on peut approximer la dissipation turbulente ϵ , en LES, par le flux d'énergie dans la zone inertielle ϵ_f , qui est calculé par:

$$\epsilon_f = \int_0^{K_c} 2(\nu + \nu_t) k^2 E(k) \, dk \tag{1.51}$$

En considérant l'effet de croissance de ν_t au voisinage du nombre d'onde de coupure (effet de 'cusp'), on calcule en effet, la dissipation d'énergie turbulente par la forme cidessous:

$$\epsilon = \int_0^{K_c} 2(\nu + \nu_t(k))k^2 E(k) \, dk \tag{1.52}$$

où $\nu_t(k)$ est défini par:

$$\nu_t(k) = \nu_t \left(1 + 1.7693 \left(\frac{k}{k_c} \right)^{3.742} \right)$$
(1.53)

Les échelles et nombres de Reynolds

L'échelle intégrale Λ est définie comme la taille moyenne des structures dont l'énergie est transmise sans dissipation appréciable. Monin et Yaglom [13] introduisent par:

$$\Lambda = \frac{\pi}{2} \frac{\int_0^\infty k^{-1} E(k) \, dk}{\int_0^\infty E(k) \, dk}$$
(1.54)

Le temps de retournement, ou 'eddy turnover time' en terme anglo-saxon, basé sur cette échelle est défini par:

$$T_{\Lambda} = \frac{\Lambda}{\sigma_u} \tag{1.55}$$

Le nombre de Reynolds correspondant est alors:

$$Re_{\Lambda} = \frac{\Lambda \, \sigma_u}{\nu} \tag{1.56}$$

où σ_u est l'écart type de vitesse.

On connaît une relation, en turbulence homogène isotrope, entre l'échelle de Taylor λ et la dissipation d'énergie ϵ :

$$\epsilon = 15 \,\nu \, \frac{\sigma_u^2}{\lambda^2} \tag{1.57}$$

et nous avons donc:

$$\lambda = \sigma_u \sqrt{\frac{15\nu}{\epsilon}} \tag{1.58}$$

Le temps caractéristique basé sur l'échelle λ est alors:

$$T_{\lambda} = \frac{\lambda}{\sigma_u} \tag{1.59}$$

On peut en même temps obtenir le nombre de Reynolds basé l'échelle de Taylor:

$$Re_{\lambda} = \frac{\lambda \, \sigma_u}{\nu} \tag{1.60}$$

Il y a une relation entre les deux nombres de Reynolds Re_{Λ} et Re_{λ} (Hinze [14] et Lesieur [15]):

$$Re_{\lambda} = 4 Re_{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \tag{1.61}$$

Dans nos simulations numériques directe (DNS), on a calculé le nombre de Reynolds de Taylor Re_{λ} par les deux approches: correspondant aux équations (1.61) et(1.60). Les résultats sont très proches. Quand il s'agit de LES, seul le nombre de Reynolds basé sur l'échelle intégrale est employé et (1.61) est utilisée pour Re_{λ} .

1.4.3 Description Lagrangienne

Dans certaines situations, la description Lagrangienne est plus adaptée que la description Eulérienne, par exemple dans l'atmosphère et dans l'océan, pour le transport turbulent de quantité de masse et chaleur. Dans les problèmes d'environnement (dispersion des polluants, Hinze [14], Bernard [16], Thomson [17]).

Un des objectifs principaux de ce travail est d'étudier respectivement l'influence des échelles de sous-maille sur la corrélation Lagrangienne de vitesse, sur l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne, sur le mélange turbulent, sur la diffusion et sur la dispersion de scalaire passif. La méthode de suivi Lagrangien des particules est naturellement choisie pour cet objectif.

Le suivi Lagrangien d'éléments fluides permet d'accéder aux statistiques Lagrangiennes de la turbulence. L'équation qui détermine le mouvement des éléments fluides fait intervenir la vitesse de ces éléments. Le caractère aléatoire de mouvement des particules fluides nous oblige à utiliser une description statistique. On "marquera" un ensemble de particules fluides indépendantes, et on fera une moyenne statistique des quantités statistiques sur cet ensemble.

Généralement, on peut écrire les équations qui contrôlent le mouvement d'une particule:

$$\begin{cases} \frac{dX_i(t)}{dt} = v_i(t) \\ X(t_0) = X_0 \end{cases}$$
(1.62)

où X(t) est la position de particule à l'instant t, $v_i(t)$ la vitesse de cette particule, et X_0 la position initiale de particule à l'instant initial t_0 .

Dans un écoulement turbulent, la vitesse d'une particule fluide peut être décomposée en deux parties: la vitesse des grandes échelles et des petites échelles. La vitesse de la particule fluide dans la direction x_i peut être ainsi écrite sous la forme suivante:

$$v_i(t) = v_i^<(t) + v_i^>(t) \tag{1.63}$$

Dans ce qui suit une hypothèse essentielle est posée pour les vitesses Eulérienne et Lagrangienne: à un l'instant t donné, la vitesse Lagrangienne des grandes échelles, $v_i^{<}(t)$, est égale à la vitesse Eulérienne du fluide à la même position de la particule fluide $x_p(t)$:

$$v_i^<(t) = u_i^<(x_p(t), t)$$
(1.64)

La vitesse Eulérienne est résolue par la LES ou la DNS, et la vitesse Lagrangienne est obtenue par un procédé d'interpolation que l'on va introduire dans le paragraphe suivant. En LES, on n'a que le champ des vitesses des grandes échelles, c'est-à-dire qu'on ne connaît pas la partie de la vitesse marquée par les petites échelles. On développe alors un modèle stochastique de sous-maille pour modéliser la vitesse Lagrangienne des petites échelles, $v_i^>$ que nous présenterons dans le Chapitre 3.

Influence de la méthode d'interpolation

Dans les simulations numériques présentées plus loin, on va suivre toutes les particules pas à pas, et évaluer les grandeurs Lagrangiennes. Pour le suivi Lagrangien des particules, il faut alors connaître la vitesse en tous points d'espace. Or, on ne connaît pas la vitesse des grandes échelles en des points qui ne sont pas sur le maillage numérique. Des schémas numériques précis pour cette interpolation spatiale sont alors nécessaires (figure 1.1).



Figure 1.1: Mouvement d'une particule. Une méthode d'interpolation précise est obligatoirement utilisée.

Choi [18] a étudié différentes méthodes d'interpolation pour le suivi des particules dans une turbulence inhomogène (écoulement de canal). Comme d'autres auteurs, il a utilisé du polynôme de Chebyshev pour la direction d'inhomogénéité (direction vertical de paroi), et il a comparé cinq schémas d'interpolation pour les deux directions homogènes: le schéma linaire, le schéma TS 13 utilisé par Yeung et Pope [19], le polynôme de Lagrange d'ordre 6 utilisé par Kontomaris [20], le schéma de Hermite utilisé par Balachandar [21] et l'interpolation directe dans l'espace spectral.

Dans le tableau (1.1), Choi [18] montre les erreurs moyennes et le temps de calcul.

	LN	LG6	HM	SPE
Erreur	0.458	0.186	0.042	0
CPU Time	0.033	0.120	0.208	24.4

Tableau 1.1: erreur de la rms de position de particules.

'LN' indique le schéma de linaire, 'LG6' le polynôme de Lagrange d'ordre 6, 'HM' le polynôme de Hermite, et 'SPE' l'interpolation directe dans l'espace spectral. La ligne 'Erreur', rms (root-mean-squared) est l'erreur de la position des particules, égale à $\frac{|\Delta l|}{\delta}$ au temps $2T_L$, (δ est la épaisseur de la couche limite), où l'on a:

$$|\Delta l| = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (l_i^n - l_e^n)^2}$$
(1.65)

Ici l_i^n est la position obtenue par interpolation, et l_e^n est la valeur exacte (interpolation directe dans l'espace spectral).

Ce travail de recherche est consacré plutôt à la turbulence homogène, de sorte que l'on peut donc utiliser le même schéma pour les trois directions. Or pour avoir une bonne statistique, on doit mettre un grand nombre de particules dans tout le domaine de la turbulence. En considérant la précision et le temps de calcul, nous avons choisi un schéma utilisant des polynômes de Lagrange d'ordre huit dans chaque direction. Cette technique est facile à implanter dans les codes numériques et demande peu de ressource informatique.

1.5 Condition de simulation numérique

1.5.1 Domaine de simulation

Le domaine correspondant à notre simulation se limite à une boîte cubique. La longueur L est égale à $32.0 \, cm$. (figure 1.2)



Figure 1.2: Le domaine et la maille de simulation.

1.5.2 Cas de simulation

Dans ce travail de recherche, nous avons fait des simulations DNS et LES pour trois nombres de Reynolds (tableau 1.2). Les résultats de DNS permettent d'être des références pour les simulations en LES, ainsi que pour la LES couplée avec un modèle stochastique, développé dans la suite. Les LES sont réalisées avec différents nombres de mailles pour la turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire. Cela nous permet d'étudier l'influence de la résolution spatiale en LES.

Cas de simulation	Notations	Re_{λ}	Simulation et Nombre de Mailles		
Cas A	A_1	65	DNS 128^{3}	LES 64^3	LES 32^3
(Turbulence homogène isotrope	A_2	94	DNS 256^{3}	LES 64^3	LES 32^3
et stationnaire)	A_3	135	DNS 256^{3}	LES 64^3	LES 32^3
Cas B	B_1	65	-	LES 64^3	-
(Turbulence homogène isotrope	B_2	94	DNS 256^{3}	LES 64^3	-
en décroissance)	B_3	135	-	LES 64^3	-
Cas C	C_1	65	-	LES 64^3	-
(Turbulence inhomogène	C_2	94	-	LES 64^3	-
en décroissance)	C_3	135	-	LES 64^3	-

Tableau 1.2: Cas de simulation.

1.5.3 Schéma numérique

- Le schéma numérique utilisé pour obtenir la solution des équations différentielles discrétisées de Navier-Stokes en temps est un schéma de Runge-Kutta du 2ème ordre.

$$\begin{cases} \widetilde{u^{n+1}} = u^n + F^n \Delta t \\ u^{n+1} = \frac{u^n + \widetilde{u^{n+1}}}{2} + \widetilde{F^{n+1}} \Delta t \end{cases}$$
(1.66)

où F est le terme spatial.

- Pour suivre des particules fluides et obtenir précisément la position des particules, le schéma du 4ème ordre de Runge-Kutta en temps est utilisé dans la simulation.

$$X^{n+1} = X^n + \frac{\Delta t}{6} \left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4 \right)$$
(1.67)

où u^n et u^{n+1} sont respectivement les vitesses à l'instant t et $t + \Delta t$, et Δt l'intervalle de temps.

$$\begin{cases} k_{1} = v(t^{n}, X^{n}) \\ k_{2} = v(t^{n} + \frac{1}{2}\Delta t, X^{n} + \frac{1}{2}\Delta t k_{1}) \\ k_{3} = v(t^{n} + \frac{1}{2}\Delta t, X^{n} + \frac{1}{2}\Delta t k_{2}) \\ k_{4} = v(t^{n} + \Delta t, X^{n} + \Delta t k_{3}) \end{cases}$$
(1.68)

Normalement, la condition de CFL, qui assure un pas de temps suffisamment petit, écrit:

$$|\widetilde{u}|_{max} \, \frac{\Delta t}{\Delta X} = 0.1 < 1 \tag{1.69}$$

où $|\widetilde{u}|_{max} = max(|u|_{max}, |v|_{max}, |w|_{max}).$

Pour l'évolution de la turbulence, la condition de CFL est déjà suffisante. Afin de bien obtenir la trajectoire des particules dans notre travail de recherche, nous avons utilisé un intervalle de temps Δt constant, plus petit que celui qui intervient dans la condition CFL.

1.5.4 Conditions aux limites

Dans les trois dimensions de l'espace physique, nous avons utilisé les conditions aux limites périodiques pour la vitesse Eulérienne et le mouvement des particules fluides.

1.5.5 Conditions initiales en temps

Pour la simulation directe ou la simulation des grandes échelles, nous avons d'abord généré une turbulence par un processus aléatoire de Rogallo [22]. Les détails sont présentés dans la section suivante. Avec cette méthode de génération, le champ de vitesse ne possède pas de transfert l'énergie entre les différentes échelles au début du calcul. Nous avons donc attendu le développement de la turbulence pour commencer à lancer des particules de fluides dans tout le domaine.

Dans cette thèse, on utilise la méthode de Rogallo avec un spectre d'énergie cinétique turbulente qui vient de l'expérience de Comte-Bellot de 1966 à 42 maille ([23], figure 1.3).



Figure 1.3: Spectre d'énergie initial. Expérience de Comte-Bellot.

Génération d'une turbulence homogène et isotrope

Pour les simulations habituelles de turbulence homogène, le champ de vitesse est défini par un processus de génération aléatoire respectant les conditions d'isotropie et d'incompressibilité du champ fluctuant, à partir de la seule donnée du spectre d'énergie E(k) (k est le module de \mathbf{k}) de la turbulence. Le champ de vitesse est défini aussi bien dans l'espace physique sous la forme $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$, que dans l'espace spectral sous la forme $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t)$ par utilisation de la transformée de Fourier.

La relation d'incompressibilité:

$$div \mathbf{u} = 0 \tag{1.70}$$

se traduit dans l'espace spectral par:

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{u}} = 0 \tag{1.71}$$

Le mode de génération aléatoire utilisé emprunté à Rogallo [22], consiste à créer un champ de vitesse dans l'espace spectral, dans le plan perpendiculaire au vecteur d'onde (k1, k2, k3), pour chaque vecteur \mathbf{k} :

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k},t) = \hat{u}_i \,\mathbf{e}_i = \alpha(k) \,\mathbf{e}'_1 + \beta(k) \,\mathbf{e}'_2 \tag{1.72}$$

où \mathbf{e}_i est une base orthonormée de l'espace spectral, $(\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2)$ est une base du plan per-

pendiculaire au vecteur d'onde **k**. $\alpha(k)$ et $\beta(k)$ sont des nombres aléatoires vérifiant la contrainte:

$$\int \hat{u} \cdot \hat{u}^* \, dA(k) = \int (\alpha \cdot \alpha^* + \beta \cdot \beta^*) \, dA(k) \tag{1.73}$$

où le symbole * indique le conjugué du vecteur ou scalaire considéré, A(k) est la surface d'une sphère dont le rayon est k. Le spectre E(k) de la turbulence est une donnée et les formes de $\alpha(k)$ et $\beta(k)$ sont choisies telles que:

$$\begin{cases} \alpha(k) = \left(\frac{E(k)}{4\pi k^2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_1} \cos(\phi) \\ \beta(k) = \left(\frac{E(k)}{4\pi k^2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_2} \sin(\phi) \end{cases}$$
(1.74)

où θ_1 , θ_2 et ϕ sont des nombres aléatoires uniformément distribués dans l'intervalle $[0, 2\pi]$.

Il suffit alors d'exprimer cette relation dans la base orthonormée (\mathbf{e}_i) . A cet effet, il suffit de déterminer la base (\mathbf{e}'_i) en fonction de (\mathbf{e}_i) sachant que la troisième composante de cette base \mathbf{e}_3 est $\frac{\mathbf{k}}{k}$.

Ce qui conduit à:

$$\begin{cases} \mathbf{e}_{1}^{'} = \frac{1}{(k_{1}^{2} + k_{2}^{2})^{\frac{1}{2}}} (k_{2} \cdot \mathbf{e}_{1} - k_{1} \cdot \mathbf{e}_{2}) \\ \mathbf{e}_{2}^{'} = \frac{1}{k(k_{1}^{2} + k_{2}^{2})^{\frac{1}{2}}} (k_{1}k_{3} \cdot \mathbf{e}_{1} + k_{2}k_{3} \cdot \mathbf{e}_{2} - (k_{1}^{2} + k_{2}^{2}) \cdot \mathbf{e}_{3}) \end{cases}$$
(1.75)

Le champ $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}, t=0)$ est alors:

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{\alpha k k_2 + \beta k_1 k_3}{k (k_1^2 + k_2^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot e_1 + \frac{\beta k_2 k_3 - \alpha k k_1}{k (k_1^2 + k_2^2)^{\frac{1}{2}}} \cdot e_2 + \frac{\beta (k_1^2 + k_2^2)^{\frac{1}{2}}}{k} \cdot e_3$$
(1.76)

Ce champ ainsi construit ne possède pas de corrélations d'ordre 3. Il est homogène et isotrope. Pour avoir un écoulement proche de la réalité, il est nécessaire de laisser décroître la turbulence isotrope ainsi générée pendant un certain temps, de sorte que l'équilibre spectral (ou la cascade d'énergie) soit bien atteint. On peut alors utiliser ce champ d'équilibre comme condition initiale pour des cas d'étude pratique.

Génération d'une turbulence inhomogène

Nous avons choisi une situation où le transport par la turbulence joue un rôle prédominant: la couche de mélange turbulente sans cisaillement. La couche de mélange sans cisaillement est composée de deux turbulences distinctes, d'échelle et de niveaux turbulents différents, sans gradient moyen (figure 1.4). Dans la thèse de Shao [24], la propriétée de cette couche de mélange et sa différence avec la couche de mélange usuelle de cisaillement sont détaillées.

La méthode de Rogallo [22] pour la génération d'une turbulence ne permet pas d'obtenir une turbulence inhomogène. Pour avoir un champ turbulent spatialement inhomogène, il faut donc combiner des champs homogènes de caractéristiques différentes, tout en respectant la condition d'incompressibilité au voisinage de la frontière des deux champs (figure 1.5).

Pour aborder ce type de situation en simulation numérique, il est nécessaire de résoudre les équation de la fluctuation turbulente dans un domaine de calcul, appelé "boite de turbulence", comprenant deux champs quasi-homogènes situés côte à côte (la figure 1.4). Ces deux champs présentent des niveaux d'énergie différents, et des échelles spatiales différentes.



Figure 1.4: Génération le champ de vitesse initiale pour le cas d'inhomogénéité.

Une technique de génération de la condition initiale pour ce type de champ turbulent est proposée dans la thèse de Shao [24]. Les champs sont obtenues en tronquant deux champs initialement homogènes et en les juxtaposant côte à côte (la figure 1.5). L'incompressibilité au voisinage de la frontière entre les deux champs est alors assurée en annulant les composantes des modes de Fourier de la fluctuation de vitesse situés hors des plans perpendiculaires aux vecteurs d'onde \vec{k} . Il suffit alors de laisser la turbulence ainsi créée évoluer librement.



Figure 1.5: Génération d'une turbulence inhomogène sans cisaillement.

1.5.6 Forçage pour le maintien d'une turbulence statistiquement stationnaire

Afin d'obtenir une turbulence homogène isotrope et stationnaire, une méthode de forçage dite déterministe est utilisée. Elle consiste à "figer" le niveau d'énergie dans une bande de nombre d'onde correspondant aux grandes échelles, par un réajustement à chaque pas de temps. Les spectres d'énergie cinétique à différents instants sont tracés sur la figure (1.6). On constate qu'avec un forçage extérieur en grandes échelles, le caractère 'statistiquement stationnaire' de la turbulence est bien satisfait dans notre simulation numérique.



Figure 1.6: Le spectre d'énergie avec le forçage extérieur. DNS 256^3 . $Re_{\lambda} = 94$.

On illustre des spectres d'énergie dans les cas de nombres de Reynolds différents sur la figure (1.7).



Figure 1.7: Le spectre d'énergie avec le forçage extérieur aux cas de nombres de Reynolds différents.

1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé les problèmes et les questions que nous cherchons à résoudre, ainsi que les méthodes et les techniques que nous avons utilisées:

- La turbulence sans vitesse moyenne générée dans une boîte cubique avec les conditions aux limites périodiques.

- Les équations de Navier-Stokes dans l'espace spectral.

- Les simulations numériques directes et les simulations numériques des grandes échelles.

- La description Eulérienne pour le champ de vitesse et la description Lagrangienne pour les particules fluides.

- La méthode d'interpolation utilisée pour obtenir la vitesse Lagrangienne des particules fluides.

Chapitre 2

Etude des quantités statistiques importantes pour le mélange turbulent

2.1 Introduction

On rappelle ici que l'objectif de ce travail est d'étudier la diffusion ou la dispersion Lagrangienne d'espèces dans une turbulence, par la simulation des grandes échelles. Dans l'approche Lagrangienne de la diffusion ou dispersion, on sait que les temps de décorrélation de vitesse ou de scalaire jouent un rôle crucial. Ces temps sont liés aux quantités statistiques telles que les corrélations de vitesse Eulériennes et Lagrangiennes, les échelles intégrales temporelles.

Ces quantités seront examinées en DNS et en LES. D'abord, nous allons donner les définitions et les formulations de ces grandeurs caractéristiques. Après avoir discuté des paramètres dans les simulations numériques, nous présentons les résultats obtenus en LES et en DNS. Les résultats numériques seront comparés, quand c'est possible, aux résultas issues des théories classiques de Inoue ([25, 26]), de Kaneda ([5, 27–29]) et de Yeung ([19, 30–33]). En comparant les résultats de DNS à ceux de LES, on espère faire ressortir l'influence de la LES, c'est-à-dire, le manque de l'influence des fluctuations des petites échelles de sous-maille sur ces grandeurs caractéristiques.

On étudiera les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, en un-point en deux temps et en deux-points en deux-temps, et en différentes échelles. En suite, nous ferons une comparaison des corrélations de vitesse dans des turbulences stationnaire et instationnaire. A la fin, nous examinerons les relations entre les différentes échelles intégrales temporelles.

Nous nous limiterons à deux cas de turbulence homogène et isotrope: l'une est statis-

tiquement stationnaire, l'autre est en décroissance.

2.2 Quantités statistiques

Nous donnons ici, les définitions de différentes corrélations et de différentes échelles, spatiales et temporelles, Eulérienne et Lagrangienne.

2.2.1 Corrélations de vitesse

La corrélation de vitesse est définie sous la forme ci-dessous (Monin & Yaglom [13], Oesterlé [34]):

$$R_{u_i u_j} = \langle u_i \, u_j \rangle \tag{2.1}$$

où u_i est la composante de la vitesse dans la direction i, et $\langle \rangle$ signifie la moyenne d'ensemble. On peut normaliser cette corrélation de vitesse par l'intensité de vitesse correspondante, ce qui fournit le coefficient de corrélation:

$$R_{u_i u_j} = \frac{\langle u_i \, u_j \rangle}{\sqrt{\langle u_i^2 \rangle \langle u_j^2 \rangle}} \tag{2.2}$$

Si la turbulence est homogène isotrope, $\langle u_i^2 \rangle = \langle u_i^2 \rangle$, on peut donc écrire:

$$R_{u_i u_j} = \frac{\langle u_i \, u_j \rangle}{\langle u_i^2 \rangle} \tag{2.3}$$

Corrélation en un-point et en deux-temps

En turbulence homogène isotrope, on ne considérer a que les fonctions de corrélation de vitesse Eulérienne et Lagrangienne dans la direction x.

• Eulérienne:

La fonction de corrélation Eulérienne en un-point (fixée dans l'écoulement dans l'espace physique) et en deux-temps est définie par:

$$R_E(t_0,\tau) = \frac{\langle u(t_0) u(t_0+\tau) \rangle}{\sqrt{\langle u(t_0)^2 \rangle} \sqrt{\langle u(t_0+\tau)^2 \rangle}}$$
(2.4)

Ici $u(t_0)$ est la vitesse Eulérienne à l'instant initial t_0 , $u(t_0 + \tau)$ est la vitesse Eulérienne (un même point) à l'instant $t = t_0 + \tau$, et τ est l'intervalle de temps.

Dans l'écoulement homogène isotrope statistiquement stationnaire, $R_E(t_0, \tau)$ ne dépend que de l'intervalle de temps τ , et ne dépend plus du temps corrélation initial (t_0) . On peut donc simplifier en écrivant $R_E(\tau) = R_E(0, \tau)$, soit encore:

$$R_E(\tau) = \frac{\langle u(0) \, u(\tau) \rangle}{\sqrt{\langle u(0)^2 \rangle} \sqrt{\langle u(\tau)^2 \rangle}}$$
(2.5)

• Lagrangienne:

La corrélation de la vitesse Lagrangienne en un-point (position instantanée sur la trajectoire de la particule fluide) et en deux-temps peut être écrite sous la forme:

$$R_L(t_0,\tau) = \frac{\langle v(t_0) v(t_0+\tau) \rangle}{\sqrt{\langle v(t_0)^2 \rangle} \sqrt{\langle v(t_0+\tau)^2 \rangle}}$$
(2.6)

où $v(t_0)$ est la vitesse Lagrangienne d'un élément fluide à l'instant initial t_0 , $v(t_0+\tau)$ est la vitesse Lagrangienne sur la trajectoire de ce même élément fluide à l'instant $t = t_0 + \tau$.

Dans l'écoulement homogène isotrope stationnaire, comme $R_E(t_0, \tau)$, $R_L(t_0, \tau)$ ne dépend que de l'intervalle du temps τ . Comme dans le cas Eulérien, elle peut ainsi se simplifier selon $R_L(\tau) = R_L(0, \tau)$, soit:

$$R_L(\tau) = \frac{\langle v(0) v(\tau) \rangle}{\sqrt{\langle v(0)^2 \rangle} \sqrt{\langle v(\tau)^2 \rangle}}$$
(2.7)

Corrélation en deux-points en deux-temps

Dans ce paragraphe, on va définir la corrélation de vitesse, Eulérienne et Lagrangienne, en deux-points et en deux-temps.

• Eulérienne:

Dans cette situation, "deux points" représentent deux positions différentes fixées dans l'écoulement turbulent.

$$R_E(x_0, t_0; r, \tau) = \frac{\langle u(x_0, t_0) \, u(x_0 + r, t_0 + \tau) \rangle}{\sqrt{\langle u(x_0, t_0)^2 \rangle} \sqrt{\langle u(x_0 + r, t_0 + \tau)^2 \rangle}}$$
(2.8)

Dans l'écoulement homogène isotrope stationnaire, $R_E(x_0, t_0; r, \tau)$ ne dépend que de

l'intervalle de temps τ et de la distance spatiale de deux points fixées r. On peut donc noter simplement $R_E(r,\tau) = R_E(x_0, t_0; r, \tau) = R_E(0, 0; r, \tau)$, soit:

$$R_E(r,\tau) = \frac{\langle u(0,0) u(r,\tau) \rangle}{\sqrt{\langle u(0,0)^2 \rangle} \sqrt{\langle u(r,\tau)^2 \rangle}}$$
(2.9)

• Lagrangienne:

Dans ce cadre, "deux points" signifient les deux positions différentes initiales sur deux trajectoires.

$$R_L(x_0, t_0; r, \tau) = \frac{\langle v(x_0, t_0) \, v(x_0 + r; t_0 + \tau) \rangle}{\sqrt{\langle v(x_0, t_0)^2 \rangle} \sqrt{\langle v(x_0 + r; t_0 + \tau)^2 \rangle}}$$
(2.10)

Dans l'écoulement homogène isotrope stationnaire, $R_L(x_0, t_0; r, \tau)$ ne dépend que de l'intervalle de temps et de la distance spatiale initiale entre les deux particules. Cette corrélation ne dépend pas du temps initial t_0 de lancer des particules, ni de la position initiale x_0 . On peut écrire $R_L(r, \tau) = R_L(x_0, t_0; r, \tau)$, soit:

$$R_L(r,\tau) = \frac{\langle v(0,0) v(r,\tau) \rangle}{\sqrt{\langle v(0,0)^2 \rangle} \sqrt{\langle v(r,\tau)^2 \rangle}}$$
(2.11)

2.2.2 Echelles intégrales temporelles

Nous savons que les échelles intégrales temporelles ont une importance fondamentale dans la modélisation statistique de la dispersion, du mélange turbulent de scalaire ou de la réaction chimique entre différentes espèces. Dans ce paragraphe, on va définir quatre échelles intégrales temporelles: Eulérienne, Lagrangienne, de retournement des grandes échelles et caractéristique en détail de la turbulence. Dans la section suivante, on va étudier en détail ces quatre temps et chercher les relations entre eux.

L'échelle intégrale temporelle Eulérienne

Après avoir intégré la courbe de corrélation temporelle de vitesse Eulérienne, nous obtenons l'échelle intégrale temporelle Eulérienne:

$$T_E = \int_0^\infty R_E(\tau) \, d\tau \tag{2.12}$$

L'échelle intégrale temporelle Lagrangienne

Comme l'échelle Eulérienne, on peut définir l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne par l'intégration de la corrélation de vitesse Lagrangienne:

$$T_L = \int_0^\infty R_L(\tau) \, d\tau \tag{2.13}$$

L'échelle temporelle de retournement des grandes échelles

Cette échelle temporelle (eddy turn-over time en anglais) signifie le temps de retournement des grandes échelles, qu'il s'écrit sous la forme:

$$T_{\Lambda} = \frac{\Lambda}{\sigma_u} \tag{2.14}$$

où Λ est l'échelle intégrale de longueur (Monin & Yaglom [13]), σ_u l'intensité des fluctuations de vitesse.

L'échelle de temps caractéristique de la turbulence

Nous connaissons aussi un temps caractéristique de la turbulence qui est obtenu à partir du déclin de l'énergie cinétique de la turbulence sous l'effet de la dissipation d'énergie, il écrit:

$$T = \frac{k}{\epsilon} \tag{2.15}$$

2.3 Choix des paramètres de calcul

2.3.1 Choix de la densité et de la distribution des particules initiales

La première question est de savoir combien de particules nous devons en même temps lancer dans l'écoulement pour bien tracer la corrélation de vitesse Lagrangienne. Par ailleurs, quelle est la nature de la distribution initiale des particules?

En fait, dans un écoulement homogène, pour avoir une statistique d'ensemble parfaite, if faut lancer chaque fois une particule particulière à une position spatiale initiale différente et à un instant initial différent (figure (2.1)). Cependant, le coût en terme de simulation numérique est trop lourd pour obtenir un résultat acceptable. On met plutôt partout, en même temps, un grand nombre de particules dans le domaine d'écoulement. Nous avons ainsi essayé de lancer respectivement des nombre de particules de 8^3 , de 16^3 et de 32^3 .



Figure 2.1: Lancement d'une particule à un instant différent et une position spatiale différente.



Figure 2.2: Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents nombres de particules lancées. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao. (1 réalisation)

Sur la figure (2.2), nous traçons la moyenne de la corrélation de vitesse Lagrangienne de toutes les particules dans le domaine. Nous avons constaté que le lissage de la courbe est liée directement au nombre de particules suivies Np. La différence est importante. Pour le cas où le nombre de particules est égale à $8^3 = 512$, les irrégularités de cette courbe sont beaucoup plus fortes que pour les deux autres. Le nombre de particules n'est ainsi pas suffisant pour obtenir une corrélation acceptable.

En outre, par rapport au cas de $Np = 32^3 = 32768$, la courbe de $Np = 16^3 = 4096$

n'est pas parfaitement lisse, mais elle est plus acceptable. On sait que si le nombre de particule continue à augmenter, la courbe deviendra de plus en plus lisse. Néanmoins, plus les particules sont nombreuses dans l'écoulement, plus la distance entre deux particules est petite. Les particules se trouvant plus proches, la corrélation ou la similarité entre leurs mouvements sont plus fortes, ce qui ne satisfait plus notre hypothèse d'indépendance des particules. C'est la raison pour laquelle le nombre des particules lancées ne soit pas être non plus trop grand.

Par ailleurs, on doit tenir compte des statistiques moyennes en temps. Sur les figures (2.3), les réalisations 1, 2 et 3 représentent respectivement trois réalisations indépendantes, à trois périodes différentes, sans moyenne statistique. Les courbes moyennées sur 10 réalisations à différentes périodes sont tracées sur les mêmes figures. On constate que les fluctuations d'énergie cinétique et du taux de dissipation sont importantes à des périodes différentes. Après avoir fait la moyenne temporelle, l'énergie et la dissipation peuvent être considérées comme deux constantes. Dans ce contexte, la recherche de la corrélation de vitesse est alors plus fiable.



Figure 2.3: Energie cinétique de la turbulence à différentes périodes. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao.

Il revient enfin des points suivants de la courbe de corrélation de vitesse Lagrangienne (moyennes en 10 réalisations) de la figure (2.4):

1. Comme attendu, la courbe de $Np = 8^3$ n'est pas aussi lisse que les courbes correspondant à $Np = 16^3$ et de $Np = 32^3$ car le nombre de particules n'est pas suffisant.

2. De plus, au niveau de la précision statistique, les cas $Np = 16^3$ et $Np = 32^3$ sont au même niveau, car il n'y a pas de différence importante entre les deux courbes.

3. Si on augmente le nombre de particules d'un facteur 8, le temps de calcul correspondant augmentera presque 8 fois.

Donc, 10 fois le cas de 16^3 particules suivies suffisent pour obtenir des résultats moyens acceptables.



Figure 2.4: Corrélation de vitesse Lagrangienne pour les différents nombres de particules. On fait la moyenne sur 10 à rélisations. Cas A_2 , LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao.

2.3.2 Choix du temps initial $t = t_0$ pour suivre des particules

A l'instant $t = t_0$, on place les particules dans l'écoulement. A partir de ce moment jusqu'au moment de $t = t_0 + \tau$, on suit chaque particule et on obtient sa position et sa vitesse Lagrangienne. En même temps, on peut calculer les grandeurs comme la corrélation de vitesse, le déplacement des particules, etc.

Un certain nombre de questions demeurent toujours posées: comment choisir le temps initial t_0 ? Quelle est l'influence de t_0 sur les statistiques?

Comme la turbulence initiale est générée par un processus de Rogallo [22], le champ de vitesse ne possède pas de transfert l'énergie entre les différentes échelles au début. Nous devons donc attendre que la turbulence devienne statistiquement stationnaire, pour commencer à lancer des particules fluides dans tout le domaine.

Les évolutions temporelles de l'énergie cinétique et la dissipation d'énergie pour une turbulence homogène isotrope et stationnaire sont données sur la figure (2.5). Au début de la génération d'écoulement, l'énergie cinétique et la dissipation de la turbulence décroissent graduellement ($t \leq 0.5$ second).

Nous avons aussi tracé l'énergie dans l'espace spectral sur la figure (2.6). Il ressort que l'énergie des grandes échelle est toujours stable grâce au forçage. Par contre, aux temps courts ($t \le 0.5$ s), l'énergie des petites échelles n'est pas stable. Toutefois, pour $t \ge 0.5$ s, la stabilité de l'énergie des petites échelles est rétablie.

On attend donc 0.5 second pour que l'énergie et la dissipation soient assez stables.



Figure 2.5: L'énergie et la dissipation de la turbulence. Résultat de DNS 256^3 , Cas A_2 .



Figure 2.6: Stabilité de l'énergie cinétique pour $t \geq 0.5s$. Cas $\,A_2\,,\,{\rm DNS}\,$ $128^3\,.$

Cette turbulence est ensuite utilisée pour commencer à lancer les particules des fluides et pour traiter le problème de suivi Lagrangien. On peut dire alors que la condition d'obtention d'une turbulence homogène isotrope et stationnaire est bien satisfaite dans notre simulation numérique ($t \ge 0.5s$).

2.4 Corrélation de vitesse dans une turbulence homogène isotrope et stationnaire

2.4.1 Corrélation en un-point en deux-temps

Influence de l'intervalle de temps

Nous avons utilisé un intervalle de temps constant en DNS et LES défini par:

$$dt = \frac{0.0128}{N}(s) \tag{2.16}$$

où N est le nombre de maille dans une direction. Par exemple, N = 64 pour la LES, fournit dt = 0.0002(s), qui est 5 fois plus petit que celui vient de la condition CFL.

Pour bien suivre des particules et faire des statistiques, il faut que l'intervalle de temps soit assez petit. Nous avons comparé les corrélations dans deux conditions: un intervalle de temps égale à dt et un intervalle égal à 2dt.

Nous avons tracé la fonction de corrélation de vitesse Lagrangienne sur les figures (2.7 et 2.8), la première pour le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et la deuxième pour celui de Cui-Shao. La figure de gauche est pour un temps long, et la droite pour un temps court. Cela montre qu'il y a des différences entre ces deux modèles de sous-maille. Pour le modèle de Chollet-Lesieur, la différence apparaît à partir du temps initial, et pour le modèle de Cui-Shao, la différence commence après 2 échelles intégrales temporelles Lagrangiennes T_L .

Nous avons calculé le temps intégral Lagrangien T_L dans tous les cas. La DNS ($Re_{\lambda} = 94$) fournit $T_L = 0.129(s)$. Les autres valeurs de T_L obtenues par les LES sont affichées dans le tableau (2.1). Pour le cas de l'intervalle de temps égale à 2dt, et avec n'importe que modèle de sous-maille, l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne est toujours supérieure à celle de l'intervalle de temps égal à dt.



Figure 2.7: Corrélation de vites se Lagrangienne pour les différents intervalles de temps. Cas A_2 , LES $\,64^3$, modèle de Chollet-Les ieur.



Figure 2.8: Corrélation de vites se Lagrangienne pour les différents intervalles de temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao.

	T_L (CH-L)	T_L (C-SH)
LES (dt)	0.181(s)	0.165(s)
LES $(2 dt)$	0.188(s)	0.175(s)

Tableau 2.1: Echelle intégrale temporelle Lagrangienne pour les différents d'intervalles de temps. LES 64^3 , Cas A_2 .



Figure 2.9: Corrélation de la vitesse pour des cas de résolution numérique différents. Cas A_2 , modèle de Chollet-Lesieur. La figure de gauche concerne le point de vu Eulérien, et celle de droite le point de vu Lagrangien.

Influence de la résolution numérique spatiale en LES

Sur la figure 2.9, nous présentons les corrélations Lagrangiennes en 2-temps, obtenues par simulation directe et par simulation des grandes échelles. Nous constatons une différence nette du comportement Eulérien et Lagrangien, pour des temps courts et long des temps longs, entre la DNS et la LES. La différence s'accroît quand la résolution en LES diminue. Cela montre qu'en LES les échelles temporelles intégrales augmentent quand la résolution numérique diminue. Ce résultat est concordant avec une étude récente de He et Rubinstein ([35, 36]).

En LES, la décroissance plus lente des corrélations peut s'expliquer par le fait qu'il y a plus de petites échelles non-résolues quand la résolution diminue. Les actions des échelles de sous-maille sont modélisées uniquement par une viscosité turbulente. Or les petites échelles ont aussi une action chaotique et destructrice des cohérences spatiales et temporelles des structures des grandes échelles. Une viscosité de sous-maille traduit mal cette action destructrice des échelles de sous-maille. Dans l'approche Eulérienne de dispersion ou de diffusion d'espèce, on emploie une diffusivité turbulente afin de combler le manque des actions de petites échelles de vitesses.

Par contre, dans l'approche Lagrangienne, les particules fluides porteuses de concentration d'espèces sont broyées uniquement par l'action du champ de vitesses des grandes échelles. Le taux de mélange d'espèces étant conditionné par les échelles de temps des vitesses du champ porteur, le manque de petites structures de vitesse pourrait impliquer un taux de mélange insuffisant. C'est pour cette raison que, nous introduirons au prochain chapitre, une fluctuation de vitesse par un modèle stochastique pour l'approche Lagrangienne de la dispersion turbulente.

Influence des modèles de sous-maille

Dans ce paragraphe, on va comparer les deux modèles de sous-maille utilisés ici: le modèle de Chollet-Lesieur [10, 12] qui est le plus classique dans l'espace spectral, et le modèle de Cui-Shao [11], qui est développé récemment au laboratoire de mécanique des fluides et d'acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon et à l'Université de Tsinghua en chine.



Figure 2.10: Comparaison les deux modèles de sous-maille. La figure de gauche concerne la corrélation de vitesse Eulérienne, et celle de droite la corrélation Lagrangienne. Cas A_1 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 65$.



Figure 2.11: Comparaison les deux modèles de sous-maille. Cas A_2 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 94$.

Sur les figures (2.10, 2.11, 2.12), les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne sont tracées. Les nombres de Reynolds sont respectivement $Re_{\lambda} = 65$, 94 et 135. Les LES sont effectuées avec des maillages de 64^3 sans le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille. CH-L indique la simulation avec le modèle de Chollet-Lesieur [10], et C-SH pour celui de Cui-Shao [11].



Figure 2.12: Comparaison les deux modèles de sous-maille. Cas A_3 , LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 135$.

Deux constats peuvent être faits. D'une part, dans les trois cas de nombres de Reynolds différents, la corrélation de vitesse Eulérienne obtenue avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao est plus proche du résultat de la DNS en temps long, par rapport à calcul avec le modèle de Chollet-Lesieur. En revanche, en temps courts, il n'y a quasiment pas de différences entre les deux modèles de sous-maille. Notons que dans le modèle de Chollet-Lesieur, une prise en compte du nombre de Reynolds est employée tandis que le modèle de Cui-Shao est développé uniquement pour un grand nombre de Reynolds. Pour la corrélation de vitesse Lagrangienne, il n'y a pas de différence notable entre les deux modèles de sous-maille.

Comparaison entre les corrélations Eulérienne et Lagrangienne

Nous avons tracé les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne obtenues par la DNS sur la même figure (2.13), et on peut considérer les résultats comme pouvant servir de référence.

Il apparaît à une grande différence entre les deux corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne. Au temps court ($t \leq 0.04s$, c'est-à-dire $t \leq 0.3T_L$), le déclin de la corrélation de vitesse Lagrangienne est un peu plus lent que celui de la corrélation Eulérienne. Mais par contre, aux temps longs ($0.3T_L \leq t \leq 4T_L$), la décroissance de la corrélation Lagrangienne est beaucoup plus rapide que celle da la corrélation Eulérienne. Ces résultats sont en accord avec les résultats de Kaneda [5,27–29,37] et Yeung [19,30–33]. A partir de $4T_L$, les deux corrélations sont stables, mais la valeur Lagrangienne est près de 0, alors que la valeur Eulérienne est d'environ 0.05.



Figure 2.13: Corrélation de la vitesse Eulérienne et Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. $Re_{\lambda} = 94$. $T_L = 0.129(s)$. $T_E = 0.190(s)$.

Comparaison entre la corrélation Lagrangienne simulée avec un modèle classique

Il existe un modèle de la fonction de corrélation Lagrangienne qui s'écrit (Inoue [25, 26]):



$$R_L(\tau) = e^{-\tau/T_L} \tag{2.17}$$

Figure 2.14: Corrélation de la vitesse Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. $Re_{\lambda} = 94$.

Nous cherchons à analyser plus précisément les comportements de la corrélation R_L . Selon les analyses de Kaneda [5,27–29] et Hinze [14], la corrélation Lagrangienne de vitesse présente deux comportements distincts pour les temps courts et pour les temps longs. On a donc tracé, sur la figure (2.14), à gauche pour les temps longs et à droite pour les temps courts, la corrélation de vitesse Lagrangienne obtenue par la DNS et la courbe modélisée par la fonction exponentielle (équation 2.17).

A temps long, le modèle exponentiel est cohérent avec le résultat de simulation DNS. Néanmoins, la figure de droite nous montre qu'il y a une grande différence pour la corrélation temporelle de la vitesse Lagrangienne en temps court (intérieur de $0.5 T_L$). La pente de la courbe exponentielle au début est $-\frac{1}{T_L}$, alors que celle de la corrélation Lagrangienne est nulle en théorie (Gence [38]) ce que retrouve notre simulation numérique. On peut dire, à temps court, que la corrélation Lagrangienne n'est pas cohérente avec cette valeur modélisée par la fonction exponentielle. Pour la corrélation de vitesse Lagrangienne à temps court, Kaneda [37] nous donne un autre modèle:

$$R_L(\tau) = e^{-\frac{\pi}{4}\,\alpha^2\,\tau^2} \tag{2.18}$$

Kaneda [37] a proposé une valeur de $0.7 \sim 0.9$ pour la constante α . Dans notre simulation numérique, la constante de Kolmogorov K_0 est 1.52 pour un nombre de Reynolds $Re_{\lambda} = 94$, et α est égale à 0.9. La comparaison entre ce modèle et notre simulation numérique est montrée sur la figure (2.15).



Figure 2.15: Corrélation de la vitesse Lagrangienne en turbulence homogène isotrope stationnaire en temps court. $Re_{\lambda} = 94$. $T = T_{\lambda}$. $c = -\frac{\pi}{4} \alpha^2$.

Nos résultats sont ainsi cohérents avec les analyses de Kaneda [27,28,37] et Hinze [14]

pour les temps courts et les temps longs.

2.4.2 Corrélation en deux-points en deux-temps

Dans ce paragraphe, on analyse clairement la fonction de corrélation de vitesse, Eulérienne et Lagrangienne, en deux-points et en deux-temps.

• Eulérienne:



Figure 2.16: Corrélation de vitesse Eulérienne en deux-points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. M représente la taille de maille. $1M = 1\Delta = \frac{L}{N}$, où L est la longueur du domaine de simulation, et N nombre de maille dans une direction. La figure de droite est normalisée par la valeur maximum dans la direction y et par le temps intégral dans la direction x.

On note ici \triangle la taille de grille dans la simulation numérique, et $\triangle = \frac{L}{N}$, L étant la longueur de la boîte cubique, et N nombre de maille dans une direction. On a calculé la corrélation de vitesse en deux-temps et en deux points fixés (la distance entre eux est $1\triangle$, $2\triangle$... jusqu'à $7\triangle$). Les courbes sont tracées sur les deux figures pour les différents modèles de sous-maille: la figure (2.16) pour le modèle de Chollet-Lesieur et la figure (2.17) pour modèle de Cui-Shao. Les figures de droite sont normalisées par les valeurs maximums pour les corrélations et par les échelles intégrales temporelles Eulérienne T_E pour le temps.

On constate, d'abord, que pour les deux modèles de sous-maille, il n'y a pas de grande différence dans les corrélations Eulériennes en deux-points en deux-temps. En outre, on trouve que les valeurs initiales des corrélations de vitesse Eulérienne diminuent si la distance entre les deux points augmente. La différence entre les courbes de corrélation Eulérienne, pour deux points fixés, sont importantes pour les temps courts ($t \leq 0.5s$). Cependant, après 0.5s, toutes les courbes de corrélation sont quasi identiques, ce qui



Figure 2.17: Corrélation de vitesse Eulérienne en deux-points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao.

montre que l'influence de la distance initiale différente disparaît aux temps longs. Après avoir été normalisées par le temps intégral dans la direction x et par les valeurs maximums dans la direction y, toutes les courbes de corrélations ont la même forme. Nos résultats concordent avec les résultats récents de He [35, 36].

De plus, on a trouvé que, la corrélation de vitesse Eulérienne en 'deux points' en deux temps n'est pas négligeable quand la distance initiale entre ces 'deux points fixés' est inférieure à 7 mailles (figure 2.16, 2.17). C'est la raison pour laquelle la corrélation de vitesse Eulérienne en un-point n'est pas nulle aux temps longs (figure 2.13). Ces résultats, en comparant les résultats DNS et LES sont en accord avec les analyses de G.W. He & R. Rubinstein [35] sur l'influence des modèles de sous-maille en LES sur les décorrélations en deux temps. On propose alors de faire la moyenne pour la corrélation de vitesse Eulérienne sur les points plus lointains (10 mailles par exemple).

• Lagrangienne:

On a tracé aussi les corrélations Lagrangiennes en deux-points et en deux temps. Il ressort que, sur la figure (2.18, 2.19), quand la distance initiale des 'deux particules' est supérieure à la longueur de trois mailles, les corrélations de la vitesse entre ces 'deux particules' sont faibles. Cela implique que toutes les particules dans la boîte sont indépendantes, et notre choix de la densité de particules (16^3 , la distance initiale entre les deux particules est égale à 4 mailles de grille) pour le suivi Lagrangien dans la simulation LES de 64^3 est raisonnable.

De plus, pour les deux modèles de sous-maille, les courbes de corrélation de vitesse Lagrangienne sont confondues, après la normalisation. Après deux échelles intégrale temporelle Lagrangienne T_L , les corrélations sont voisines de zéro. Ces corrélations Lagrangiennes sont ainsi différentes de corrélations Eulériennes.



Figure 2.18: Corrélation de vitesse Lagrangienne en deux points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. M représente la taille de maille de simulation.



Figure 2.19: Corrélation de vitesse Lagrangienne en deux points en deux temps. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de Cui-Shao.

2.4.3 Corrélations entre des échelles spatiales différentes

Après avoir analysé, par la DNS pour $Re_{\lambda} = 94$, la corrélation de vitesse en deux points différents, nous allons faire une analyse de la corrélation de vitesse Eulérienne pour différentes échelles. D'abord, on filtre le champ de vitesse à chaque instant par la méthode de 'narrow-band' dans l'espace spectral (Comte-Bellot [39]).

$$\widetilde{\widehat{u}}(k_i, t) = \widehat{u}(k, t) G_{nb}(k_i)$$
(2.19)

où la fonction de filtrage de Comte-Bellot $G_{nb}(k_i)$, k_i nombre d'onde, est telle que :

$$G_{nb}(k_i) = \begin{cases} 1 \ si \ k \in (k_i, k_i + dk) \\ 0 \qquad sinon. \end{cases}$$
(2.20)

La corrélation de vitesse temporelle Eulérienne pour différents nombres d'onde (autrement dit pour différentes échelles) s'écrit:

$$R_E^{NB}(k_i, t_0, \tau) = \frac{\langle \widetilde{u}(k_i, t_0) \widetilde{u}(k_i, t_0 + \tau) \rangle}{\sqrt{\langle \widetilde{u}(k_i, t_0)^2 \rangle} \sqrt{\langle \widetilde{u}(k_i, t_0 + \tau)^2 \rangle}}$$
(2.21)

Dans l'espace spectral, on a:

$$k_i = \frac{2\pi}{L}i$$

où L est la longueur de la boîte, L = 32 cm, et i un nombre entier:

$$-\frac{N}{2} \le i \le \frac{N}{2} - 1 \tag{2.22}$$

où N est le nombre de mailles dans une direction,

Nous avons choisi 4 nombres d'onde (note ici K_1 , K_2 , K_3 et K_4) qui représentent les échelles spatiales différentes pour rechercher les corrélations Eulériennes en différentes échelles:

$$k_1 = \frac{2\pi}{L} 2$$
$$k_2 = \frac{2\pi}{L} 5$$
$$k_3 = \frac{2\pi}{L} 18$$
$$k_4 = \frac{2\pi}{L} 80$$



Figure 2.20: Corrélation de vitesse Eulérienne par le filtre 'Narrow-Band'. $Re_{\lambda} = 94$.

On a tracé ces quatre corrélations de vitesse Eulérienne filtrées pour les différents nombres d'onde sur la figure (2.20). La partie droite représente les temps courts. Ici, 'Total' signifie la corrélation mettent en jeu toutes échelles, c'est-à-dire qui correspond à aucun filtrage 'Narrow-Band'.

Pour k_1 , le nombre d'onde le plus petit, l'échelle est la plus grande. La courbe de k_1 représente la corrélation des grandes structures. La décroissance de la corrélation de k_1 est très lente.

On voit aussi sur ces figures, avec l'augmentation du nombre d'onde k, c'est-à-dire avec la diminution de l'échelle spatiale, que les corrélations de vitesse Eulérienne diminuent plus vite. Pour k_4 , le temps de décorrélation est vers 0.01 seconde.

Afin de mieux comprendre les corrélations et les temps pour différentes échelles, on doit faire une normalisation. On a trouvé deux approches, utilisées par différents chercheurs, pour déterminer le temps caractéristique pour différentes échelles.
Méthode utilisée par He [35, 36] et Squires [40].

Une relation classique entre l'échelle et le nombre d'onde dans l'espace spectral est:

$$\Delta_i \sim \frac{1}{k_i} \tag{2.23}$$

Les échelles intégrales temporelles pour les nombres d'onde différentes peuvent ainsi s'écrire:

$$T_{k_i} = \frac{1}{\sigma_u \, k_i} \tag{2.24}$$

où σ_u est l'écart type de vitesse. Dans notre simulation numérique, $\sigma_u = 17.8 \,(\text{cm/s})$, et on peut donc normaliser les corrélations Eulériennes en différentes échelles par les temps T_{k_i} , soit:

$$t_{k_i}^* = \frac{t}{T_{k_i}}$$
(2.25)

Nous avons calculé ces temps caractéristiques qui apparaissent dans le Tableau 2.2.

$k_1 = 0.393$	$T_{k_1} = 0.143(s)$
$k_2 = 0.982$	$T_{k_2} = 0.0572(s)$
$k_3 = 3.53$	$T_{k_3} = 0.0159(s)$
$k_4 = 15.7$	$T_{k_4} = 0.003575(s)$

Tableau 2.2: Echelles temporelles correspondant à des nombres d'onde différents.

Méthode utilisée par Comte-Bellot et Corrsin [39].

Comte-Bellot et Corrsin ont défini le temps caractéristique associé aux différentes échelles (différents nombres d'ondes) en faisant intervenir quatre temps:

$$T_k = \left[\frac{1}{T_C(k)} + \frac{1}{T_R(k)} + \frac{1}{T_S(k)} + \frac{1}{T_D(k)}\right]^{-1}$$
(2.26)

Ici T_C , T_R , T_S et T_D représentent respectivement le temps de convection, de rotation, de déformation et de diffusion. (Gotoh [41] utilise seulement le temps de déformation pour l'échelle temporelle Lagrangienne.) Ils sont définis explicitement par:

$$T_C(k) = \left[k^2 \int_0^k E(p) \, dp\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{2.27}$$

$$T_R(k) = \left[\int_0^k p^2 E(p) \, dp\right]^{-\frac{1}{2}}$$
(2.28)

$$T_S(k) = \left[\int_0^k p^2 E(p) \, dp\right]^{-\frac{1}{2}}$$
(2.29)

$$T_D(k) = \left[k^4 \int_k^\infty p^{-2} E(p) \, dp\right]^{-\frac{1}{2}}$$
(2.30)

où E(p) est le spectre d'énergie. Les temps caractéristiques apparaissent dans le Tableau 2.3.

$k_1 = 0.393$	$T_{k_1} = 0.078(s)$
$k_2 = 0.982$	$T_{k_2} = 0.021(s)$
$k_3 = 3.53$	$T_{k_3} = 0.0065(s)$
$k_4 = 15.7$	$T_{k_4} = 0.0021(s)$

Tableau 2.3: Echelles temporelles correspondant à des nombres d'onde différents.

On constate alors que les échelles intégrales temporelles par la méthode de Comte-Bellot sont environ la moitié de ceux proposés par He et Squires. Cette différence n'a pas d'influence sur la normalisation. Nous avons donc choisi la méthode citée dans les travaux de He [35,36] et de Squires [40].

Sur la figure (2.21), on a tracé les corrélations Eulériennes pour les différentes échelles après normalisation du temps par les temps caractéristiques. Il ressort que les courbes correspondant aux petites échelles (grandes nombres d'ondes) de k_3 et k_4 sont voisines. Nous avons comparé notre résultat avec le travail de Squires [40] (figure 2.22). Pour les nombre d'ondes $k \ge 7$, toutes les corrélations Eulériennes en différentes échelles se superposent sur une même courbe après la normalisation.

2.5 Corrélation de vitesse dans un écoulement nonstationnaire

Dans ce paragraphe, on considère une turbulence homogène isotrope et décroissante. On va étudier l'influence du choix de temps initial t_0 pour la corrélation de vitesse dans un écoulement non-stationnaire et faire une comparaison avec le cas stationnaire.



Figure 2.21: Corrélation de vitesse Eulérienne par le filtre 'Narrow-Band' et normalisée par l'échelle temporelle. $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 2.22: Corrélation de vitesse Eulérienne obtenue par la DNS de Squires. $Re_{\lambda} = 43$. Nombre d'onde: k = 2 + 5n, et n = 1, 2, ...11.



Figure 2.23: Décroissance de l'énergie cinétique pour une turbulence non-stationnaire. $Re_{\lambda} = 65$.

Sur la figure (2.23), est tracée l'évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente, dont le déclin suit bien une loi en puissance:

$$k(t) = k(0) t^{-n} \tag{2.31}$$

L'exposant n est égal à -1.3, qui est très proche du résultat de l'expérience de Comte-Bellot [23, 39].

Les spectres d'énergie cinétique turbulente, pour différents instants correspondants aux différentes section de mesure dans l'expérience de Comte-Bellot, sont tracés sur la figure (2.24). Les spectres d'énergie pour un nombre de Reynolds $Re_{\lambda} = 94$ sont tracés sur la figure (2.25). Les résultats de simulation sont obtenus par LES avec un maillage en 64^3 et par DNS en 128^3 . Nous pouvons constater que les résultats de simulation se comparent bien avec l'expérience pour un maillage grossier (64^3), ainsi notre simulation numérique a bien reproduit une turbulence décroissante réelle.

2.5.1 Influence du temps initial sur les corrélations de vitesse dans une turbulence non-stationnaire

Sur la figure (2.26), on a tracé l'énergie cinétique d'une écoulement turbulent homogène isotrope statistiquement non-stationnaire. Les questions qui se posent sont alors les suivantes: à moment lance-t-on les particules pour le suivi Lagrangien? Est-ce qu'il y a une influence du temps initial sur la corrélation?



Figure 2.24: Comparaison le spectre d'énergie dans une turbulence homogène en décroissance. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 65$.



Figure 2.25: Spectre d'énergie en temps différents dans une turbulence homogène en décroissance. Résultats de DNS 256^3 . $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 2.26: Evolution d'énergie cinétique dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement non-stationnaire. $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 2.27: Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94$.

La figure (2.27) montre l'influence de la condition initiale sur les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne. La figure de gauche concerne la corrélation de vitesse Eulérienne et celle de droite la corrélation Lagrangienne. Nous avons choisi deux temps initiaux différents pour étudier leur influence.

Dans le cas $t_0 = 0.1$ (s), les particules sont lâchées dès le début de la génération de la turbulence. Dans l'autre cas où $t_0 = 0.3$ (s), les particules sont lâchées après un temps de retournement initial. On voit que les deux courbes, Eulériennes ou Lagrangiennes, s'écartent rapidement. Ce qui montre que l'instant initial t_0 , où on lâche les particules, joue un rôle dans la corrélation de vitesse.

2.5.2 Comparaison entre les corrélations de vitesse obtenues dans une turbulence stationnaire et dans une turbulence non-stationnaire



Figure 2.28: Energie cinétique pour les turbulences stationnaire et non-stationnaire. LES 64^3 , $Re_{\lambda} = 94$.

Sur la figure (2.28), nous avons tracé l'évolution de l'énergie cinétique pour une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire avec un forçage extérieur, et pour une turbulence décroissante sans le forçage extérieur, après $t_0 = 0.5$ (s). Les résultats des corrélations de vitesse présentés ci-après, correspondent au temps $t_0 = 0.5(s)$ pour le cas non-stationnaire.

Nous avons comparé la corrélation de vitesse Lagrangienne pour la turbulence stationnaire et non-stationnaire pour les calcul en DNS (figure 2.29). Nous avons tracé aussi



Figure 2.29: Corrélation de vitesse Lagrangienne pour des turbulences homogènes isotropes stationnaire et non-stationnaire. Résultat de DNS. $Re_{\lambda} = 94$.

les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne pour les calcul en LES (figure 2.30, 2.31).



Figure 2.30: Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope stationnaire et non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94$.

Nous trouvons que la corrélation de vitesse dans la turbulence statistiquement stationnaire décroît plus vite que dans la turbulence non-stationnaire. Cela reflète le fait que dans la turbulence en décroissance, les échelles intégrales en temps et en espace augmentent progressivement.



Figure 2.31: Corrélation de vitesse pour la turbulence homogène isotrope stationnaire et non-stationnaire. Résultat de LES avec le modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 65$.

2.6 Echelles intégrales temporelles dans une turbulence stationnaire

Sur la figure (2.32), on trace l'évolution des échelles intégrales temporelles Eulérienne (à gauche) et Lagrangienne (à droite) dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire. On trouve que l'échelle de temps Lagrangienne devient constante après 0.5 seconde, et par contre, que l'échelle de temps Eulérienne augmente constamment. Par rapport au modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne en temps long issue du modèle de sous-maille de Cui-Shao est plus proche de celle de la DNS.



Figure 2.32: Echelle intégrale temporelle. La figure de gauche concerne le temps Eulérien, et celle de droite le temps Lagrangien. Cas A_2 , LES 64^3 .

Relation entre les échelles intégrales temporelles différentes

Nous avons affiché les quatre échelles intégrales temporelles, définies au début de ce chapitre, sur les tableaux (2.4, 2.5, 2.6).

	DNS	LES (CH-L)	LES (C-SH)
T_E	0.250	0.374	0.313
T_L	0.129	0.163	0.163
T_{Λ}	0.204	0.219	0.217
T	0.457	0.440	0.441

Tableau 2.4: Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda}=65$.

	DNS	LES (CH-L)	LES (C-SH)
T_E	0.243	0.314	0.319
T_L	0.121	0.156	0.154
T_{Λ}	0.190	0.210	0.208
T	0.460	0.434	0.437

Tableau 2.5: Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda} = 94$.

	DNS	LES (CH-L)	LES (C-SH)
T_E	0.272	0.377	0.354
T_L	0.126	0.161	0.164
T_{Λ}	0.178	0.211	0.209
T	0.462	0.428	0.423

Tableau 2.6: Les échelles intégrales temporelles. $Re_{\lambda} = 135$.

Yeung [31] donne une relation entre l'échelle de temps Lagrangienne T_L et l'échelle de temps des gros tourbillons T_{Λ} basée sur les résultats des simulations DNS ($Re_{\lambda} = 38 \sim 135$):

$$\frac{T_L}{T_\Lambda} = 0.72\tag{2.32}$$

On donne la valeur de ce rapport obtenue dans notre simulation numérique dans le tableau (2.7).

On constate que les échelles de temps intégrales obtenues en LES sont plus grandes qu'en DNS, en concordance avec les constatations faites sur les corrélations de vitesses au paragraphe 2.4.1. Son influence dans la diffusion ou dispersion Lagrangienne sera clairement mise en lumière dans le chapitre où l'on simule deux cas de dispersion Lagrangienne d'un scalaire, dans une turbulence homogène et dans une turbulence inhomogène.

	DNS	LES (CH-L)	LES $(C-SH)$
$Re_{\lambda} = 65$	0.632	0.744	0.745
$Re_{\lambda} = 94$	0.637	0.743	0.740
$Re_{\lambda} = 135$	0.708	0.763	0.785

Tableau 2.7: Rapport entre l'échelle de temps Lagrangienne et l'échelle temporelle des gros tourbillons.

2.7 Conclusion

Nous avons d'abord développé une technique précise, fondée sur une interpolation avec des polynômes de Lagrange de degré 7, de suivi des particules dans un écoulement turbulent. Ensuite nous avons effectué une série de simulations numériques directes et de simulations des grandes échelles. Les situations physiques concernent le cas de la turbulence homogène en décroissance et le cas de la turbulence maintenue statistiquement stationnaire.

Nous avons jusqu'à présent caractérisé systématiquement les grandeurs importantes pour la diffusion de scalaire et le mélange turbulent avec ou sans réactions chimiques telles que les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, les échelles intégrales temporelles associées aux différentes tailles de structures turbulentes en des points différents et en des temps différents dans le cadre d'une turbulence homogène isotrope, par la simulation directe et par la simulation des grandes échelles. Nous avons constaté que:

- Le champ de vitesse est bien simulé par la DNS et la LES compte tenu d'une comparaison avec les résultats de l'expérience (Comte-Bellot [23,39]).

- Les corrélations de vites se obtenues en DNS sont en bon accord avec l'analyse théorique (Kaneda $[5,27\mathchar`-29]$ et Hinze [14]) .

- En LES, différents modèles de sous-maille, Chollet & Lesieur [10, 12] et Cui & Shao [11], donnent les corrélations de vitesses quasi identiques.

- La corrélation de vitesse Eulérienne n'est pas identique à la corrélation Lagrangienne, pour des temps courts et des temps longs.

- Les relations entre les échelles intégrales temporelles sont cohérentes avec les résultats antérieurs (Yeung [19,31,32,42]).

- Il y a des différences importantes sur les corrélations de vitesse et sur les échelles de temps intégrales, entre la simulation DNS et la LES. En LES, ces différences vont perturber de manière significative, la dispersion ou diffusion Lagrangienne d'espèces, comme nous verrons dans le dernier chapitre de cette thèse.

Le temps de calcul

Pour avoir une bonne statistique, dans le cas de la turbulence stationnaire, les résultats sont moyennés en temps, sur des intervalles suffisamment grands. Ce qui induit un coût de calcul assez élevé. Sur la machine vectorielle de l'IDRIS, les simulations directes du cas de la turbulence forcée ont été réalisées, en utilisant un maillage comportant 256³ points pour $Re_{\lambda} = 94$ et 135. Sur le calculateur Mercure de LMFA, la DNS correspond à 128³ points pour le cas $Re_{\lambda} = 65$. De plus, plusieurs simulations des grandes échelles sont effectuées avec des maillages plus petits (32³ et 64³).

Les temps de calcul sont affichés sur le tableau (2.8).

Champ de vitesse	Nombre des particules	Calculateur	Temps de calcul (Heure)
LES 64^3	$16^{3} \times 10$	Mercure de LMFA	50
DNS 128^{3}	$16^3 \times 10$	Mercure de LMFA	600
DNS 256^{3}	$16^3 \times 10$	NEC-SX5 d'IDRIS	500

Tableau 2.8: Temps de calcul.

Chapitre 3

Modèle stochastique de Langevin

3.1 Introduction

Nous avons rappelé que l'approche Lagrangienne est naturelle et plus adaptée pour traiter les problèmes de dispersion et de diffusion d'un scalaire et de mélange turbulent. Dans ce travail, la méthode Lagrangienne est adoptée pour permettre d'observer les trajectoires des particules fluides (ensembles de molécules), et mieux connaître le processus de mélange turbulent ou de dispersion de scalaire dans un écoulement turbulent.

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les champs de vitesse Lagrangienne, interpolés à l'aide des champs Eulérien obtenus en simulation des grandes échelles, ont des corrélations des vitesses spatio-temporelles surestimées. A cause de l'absence des fluctuations de vitesse de sous-maille dans une LES, seule l'action dissipative des petits tourbillons est modélisé à travers une viscosité turbulente. Mais les petites structures jouent aussi un rôle important dans la destruction des cohérences spatiales et temporelles des gros tourbillons. On peut déjà anticiper que, dans le cas de la dispersion Lagrangienne, le manque de vitesse Lagrangienne de sous-maille induise une dispersion insuffisante. Il se pose alors la question de reconstituer le plus fidèlement possible les actions du champ de vitesse Lagrangienne dans une LES.

Le manque d'effet de "destruction de cohérence" sur le champ Eulérien peut être partiellement comblé dans une LES, lorsqu'un modèle de sous-maille de type "backscatter stochastique", est utilisé en complément d'un modèle à viscosité turbulente, comme l'a remarqué J.P Bertoglio en 1986 [43]. Rappelons que les modèles de sous-maille "backscatter stochastique" introduisent une force aléatoire ayant un certain temps de mémoire.

Par analogie avec la modélisation stochastique classique pour la dispersion turbulente, dans le cadre de modélisation statistique de la turbulence, nous allons reconstituer les vitesses Lagrangiennes de sous-maille, à l'aide d'un modèle stochastique de type Langevin. Nous allons d'abord rappeler l'équation classique de Langevin, et décrire quelques applications en modélisation stochastique de la turbulente. Ensuite nous introduiront une modélisation stochastique pour le champ de vitesse Lagrangienne de sous-maille.

3.2 Le mouvement brownien

On peut écrire les équations qui contrôlent le mouvement d'une particule:

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}(\mathbf{X}_{0},t)}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{X}_{0},t) \\ \mathbf{X}(t_{0}) = \mathbf{X}_{0} \end{cases}$$
(3.1)

où $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ est la position de particule à l'instant t, qui vient de sa position initial \mathbf{x}_0 à l'instant initial t_0 ; $\mathbf{v}(\mathbf{x}_0, t)$ est la vitesse de cette particule qui se trouve à la position $\mathbf{x}(t)$ à l'instant t.

Nous allons raisonner en analogie avec le modèle de déplacement microscopique d'une molécule suivant la théorie du mouvement *brownien*. Lorsqu'une particule de taille microscopique (suffisamment grande pour être suivie au microscope mais suffisamment petite pour avoir une trajectoire sensible au choc de chaque molécule) est mise dans un fluide, elle bouge très irrégulièrement. On ne peut pas décrire exactement ce mouvement. C'està-dire que l'on ne connaît pas exactement la position et la vitesse de la particule à l'instant t. Il faudrait connaître le déplacement de chaque molécule, les caractéristiques exactes des chocs moléculaires, les conditions initiales et les conditions aux limites du domaine d'étude; il faudrait en quelque sorte un arrêt sur image au niveau moléculaire. Mais cette trajectoire est aussi chaotique que l'agitation moléculaire et on peut espérer avoir 10^{10} collisions par seconde dans un gaz dans des conditions normales de température et de pression. Il est donc impossible de connaître exactement la trajectoire réelle d'une particule immergée dans un écoulement. Les outils statistiques sont alors nécessaires pour caractériser quelques propriétés de sa trajectoire afin de la modéliser.

3.3 Introduction de l'équation de Langevin

Wiener [44] a construit un processus stochastique pour représenter la position d'une particule soumise au mouvement *brownien*. Langevin [45] a conçu un modèle en tenant compte des effets d'inertie des particules. Pour simplifier, on le considère sur une dimension. L'équation générale du mouvement d'une particule est donnée par la loi de Newton:

$$m\frac{dv}{dt} = -m\mu v + f(t) \tag{3.2}$$

où m est la masse de particule, et v la vitesse Lagrangienne. Cette équation est appelée aussi Equation de Langevin, et f(t) est aléatoire et suit une loi de probabilité gaussienne.

Nous pouvons voir que, dans l'équation (3.2), le mouvement de la particule est dominé par deux forces caractérisant toutes les deux l'effet du fluide sur la particule. L'un est la force de frottement visqueux $-m\mu v$, caractérisée par le coefficient de frottement, et l'autre la force fluctuante f(t), qui représente les impacts incessants des molécules du fluide sur cette particule dont l'effet moyen est représenté par le frottement. La force fluctuante est supposée indépendante de la vitesse de la particule, elle est donc une force extérieure, appelée force de Langevin.

C'est le premier exemple d'une équation différentielle stochastique. La force de frottement et la force fluctuante représentent deux conséquences du même phénomène physique, les collisions de la particule avec les molécules du fluide.

La plupart des modèles utilisés supposent que la position de la particule fluide évolue de façon markovienne, c'est-à-dire que la position future ne dépend que de son état présent et non de ses états antérieurs. Les variations de la vitesse à deux instants successifs sont alors décorrélées, et cela suppose que le temps intégral de l'accélération T_a est beaucoup plus petit que le temps intégral T_v de la vitesse:

$$T_a \ll T_v$$

Monin et Yaglom [13] montrent que le rapport entre les deux échelles de temps est une fonction du nombre de Reynolds:

$$T_a = Re_L^{-1/2} T_v \tag{3.3}$$

La condition $T_a \ll T_v$ n'est ainsi vérifiée que pour un nombre de Reynolds assez grand.

3.4 Rappel sur l'équation de Langevin classique

On considère des sources S_i lâchant des particules fluides. On fait l'hypothèse que chaque particule suivie est constituée d'un ensemble indissociable de n molécules. Ceci revient à supprimer l'effet de la diffusivité moléculaire. Ces particules sont injectées de façon passive, c'est-à-dire sans rajout de quantité de mouvement. On observe le mouvement de toutes les particules en même temps, et en suite, on fait une statistique (moyenne d'ensemble) sur ces particules.

Afin de déterminer les coefficients intervenant dans l'équation de Langevin (3.2), on va se positionner dans le cas le plus simple: une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire sans vitesse moyenne.

$$\begin{cases}
 u_i(x, y, z, t) = \langle u_i(x, y, z, t) \rangle + u'_i(x, y, z, t) \\
 \langle u_i(x, y, z, t) \rangle = 0
\end{cases}$$
(3.4)

où l'on a fait la décomposition du champ de vitesse de particule u_i en sa moyenne $\langle u_i \rangle$ et sa fluctuation u'_i .

Par analogie avec les travaux de Langevin, on développe une méthode pour rechercher les variations de vitesse des particules avec le temps. Cette approche caractérisant la trajectoire aléatoire d'une particule dans un écoulement turbulent est issue d'une analogie avec le modèle de déplacement microscopique d'une molécule suivant la théorie du mouvement brownien. On peut écrire une équation de Langevin classique sous la forme:

$$\begin{cases} \frac{dv_i(t|X_0, t_0)}{dt} = av_i(t|X_0, t_0) + f_i \\ \langle f_i \rangle = 0 \end{cases}$$
(3.5)

On considère qu'il y a deux forces qui contrôlent le mouvement de la particule, l'un est la force d'amortissement qui est proportionnelle à la vitesse de la particule, l'autre est la force aléatoire qui est nulle en moyenne. La difficulté est de comprendre cette force aléatoire.

3.5 Modèle stochastique à une particule en turbulence homogène isotrope

3.5.1 Approche discrète

On suppose dans ce paragraphe que la turbulence est homogène, isotrope et statistiquement stationnaire. On se limite ici à l'analyse du cas idéal de la dispersion turbulente tridimensionnelle. Dans la suite, les variables Eulériennes seront indicées par la lettre Eet les variables Lagrangiennes par la lettre L.

La particule issue de la source sera convectée par le champ fluctuant dans les trois directions. Elle sera déterminée par sa position $X_i(t|X_0, t_0)$ et sa vitesse $v_i(t|X_0, t_0)$. On s'intéresse dès lors à la détermination du modèle qui va nous donner le champ fluctuant. Dans un écoulement où le nombre de Reynolds est suffisamment grand, on pourra faire l'hypothèse que le processus aléatoire donnant la position et la vitesse (X_i, v_i) de la particule fluide des petites échelles dans l'espace des phases est markovien.

La turbulence étant supposée homogène isotrope et statistiquement stationnaire, le champ Lagrangien de vitesse turbulente v vérifie les hypothèses suivantes:

- (H1) $v_L(t|X_0, t_0)$ est une fonction aléatoire gaussienne,

- (H2)
$$\langle v_L^2(t|X_0, t_0) \rangle = \sigma_L^2$$
 est constante,

- (H3) T_L est constante.

On a introduit l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne de la vitesse T_L issue de la fonction de corrélation temporelle Lagrangienne de la vitesse $R_L(t)$. L'hypothèse (H1) est vérifiée expérimentalement; les autres sont des conséquences directes des hypothèses d'homogénéité et de stationnarité de la turbulence.

Lumley [46] a montré qu'en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire, les écarts types des fluctuations des champs de vitesse Lagrangien et Eulérien étaient égaux. Nous pouvons écrire:

$$\sigma_E = \sigma_L = \sigma \tag{3.6}$$

On peut écrire encore l'égalité résultat de l'isotropie:

$$\sigma_u = \sigma_v = \sigma_w = \sigma \tag{3.7}$$

En retenant dans un premier temps que les trois hypothèses (H1, H2 et H3), il vient les propositions: α , β , γ suivantes:

• α . Le processus a la même structure locale qu'un processus à incrémentation indépendantes. Le processus markovien (X_i, v_i) (Taylor [47]) peut alors être décrit par l'équation de Langevin sous forme discrétisée:

$$v_i^{n+1} = a \, v_i^n + b \, \xi^{n+1} \tag{3.8}$$

où v_i^n est la vitesse de la particule Lagrangienne à l'instant $n\Delta t$, v_i^{n+1} sa vitesse à l'instant $(n+1)\Delta t$, et $\{\xi^n\}$ un ensemble de variables aléatoires suivant la loi normale, sont tells que:

$$\langle \xi^n \rangle = 0 \tag{3.9}$$

$$\langle \left(\xi^n\right)^2 \rangle = 1 \tag{3.10}$$

$$\langle \xi^n \, \xi^m \, \rangle = \delta_{nm} \tag{3.11}$$

En fait, dans l'équation de Langevin sous forme discrète, on écrit la vitesse de la particule Lagrangienne v^{n+1} sous la forme d'une somme d'une partie linéaire déterministe $a v^n$ (qui conservera la gaussiennité) et d'un processus de Wiener $b \xi^{n+1}$ où les ξ^n sont des variables aléatoires suivant la loi normale, non corrélée entre elles (l'effet de mémoire a déjà été introduit dans la partie déterministe).

Il reste deux paramètres a et b à déterminer.

• β . En multipliant l'équation (3.8) par v^{n+p} et en moyennant cette nouvelle égalité, on obtient :

$$\langle v_i^{n+1} \, v_i^{n+p} \,\rangle = a \,\langle v_i^n \, v_i^{n+p} \,\rangle = \dots = a^{p+1} \,\langle (v_i^n)^2 \rangle \tag{3.12}$$

soit, en utilisant hypothèse (H2):

$$\langle v_i^n \, v_i^{n+p} \, \rangle = a^p \, \sigma_v^2$$

En sommant ces termes sur $p\,,$ on trouve, compte tenu de l'hypothèse H3, la valeur de $a\,:$

$$a = 1 - \frac{\Delta t}{T_L}$$

où Δt est l'intervalle de temps, T_L l'échelle de temps intégral Lagrangienne et σ_v l'écart type des fluctuations de vitesse de particule marquée (Lamb [48]). Dans ce qui suit, on va s'intéresse au choix de ces paramètres.

• γ . Si maintenant on élève l'équation (3.8) au carré et l'on moyenne cette nouvelle expression, on obtient:

$$b^2 = (1 - a^2) \, \sigma_v^2$$

soit:

$$b = \sigma_v \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left(2 - \frac{\Delta t}{T_L}\right)}$$

La formulation discrète du système final d'équations donnant la position de la particule s'écrit alors:

$$\begin{cases} X_i^{n+1} = \frac{v_i^n + v_i^{n+1}}{2} \Delta t \\ v_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) v_i^n + \sigma_v \sqrt{\frac{\Delta t}{T_L} \left(2 - \frac{\Delta t}{T_L}\right)} \xi^{n+1} \end{cases}$$
(3.13)

En faisant tendre Δt vers 0, on trouve l'équivalence continue de ce modèle discret, ce qui est une vérification de la consistance du schéma discret par rapport au problème continu:

$$\begin{cases} \frac{dX_i}{dt} = v_i \\ dv_i = -\frac{v_i}{T_L} dt + \sigma_{v_i} \sqrt{\frac{2}{T_L}} \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\xi^{n+1}}{\sqrt{\Delta t}} \Delta t \end{cases}$$
(3.14)

On trouve dans la littérature que:

$$d\xi(t) = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\xi^{n+1}}{\sqrt{\Delta t}} \Delta t$$

est une variable aléatoire suivant une loi gaussienne centrée, telle que:

$$\langle d\xi(t) d\xi(t') \rangle = \delta(t - t') dt$$

au sens des distributions. L'évolution de la vitesse est alors donnée par l'équation:

$$dv_i = -\frac{v_i}{T_L}dt + \sigma_{v_i}\sqrt{\frac{2}{T_L}}d\xi$$
(3.15)

On trouve bien, moyennant les hypothèses (H1), (H2) et (H3), que l'évolution de la vitesse Lagrangienne est régie par une équation de Langevin.

3.5.2 Equation de Fokker-Planck

Afin de vérifier que le modèle stochastique Lagrangien à une particule et une échelle de temps est bien cohérent avec l'approche Eulérienne classique donnant l'équation d'évolution de la concentration moyenne, il est intéressant de revenir sur le passage de l'un à l'autre. Pour ce faire, il faut trouver une équation d'évolution de la fonction de distribution de probabilité (d.d.p.) Lagrangienne à l'aide des informations que nous possédons sur la

variable aléatoire modélisant la position du point, représentant la position et la vitesse de la particule fluide dans l'espace des phases (\mathbf{X}, \mathbf{v}) .

Pope [49] décrit les méthodes de d.d.p. pour calculer les propriétés de la turbulence dans les écoulements réactifs. Nous présentons ici l'équation de Fokker-Planck pour obtenir une description statistique de la couple "position-vitesse" Lagrangienne d'une particule.

On peut définir le vecteur position instantanée du point dans l'espace des phases par:

$$\widetilde{x} = (X_i, v_i)$$
 $i = 1, 2, 3$ (3.16)

où x_i et v_i sont respectivement la position et la vitesse de particule fluide.

Si on pose $P_L(\tilde{x}; t | \tilde{x}_0; t_0)$ pour la d.d.p. Lagrangienne associée à l'événement consistant en ce que le point se trouve en \tilde{x} à l'instant t sachant qu'il était initialement en \tilde{x}_0 , il est possible de démontrer que cette fonction satisfait l'équation de Fokker-Planck si la vitesse de ce point est régie par une évolution Markovienne (Gence [38], Michelot [50]):

$$\frac{\partial P_L}{\partial t}(\widetilde{x};t) = -\frac{\partial (D_i(\widetilde{x};t) P_L)}{\partial \widetilde{x}_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 (D_{ij}(\widetilde{x};t) P_L)}{\partial \widetilde{x}_i \partial \widetilde{x}_j}$$
(3.17)

$$i = 1, 2; \quad j = 1, 2$$

où \widetilde{x}_i est la composante *i* de \widetilde{x} dans l'espace des phases.

Nous présentons ici une variable aléatoire $\xi_i(t) = f_i(\tilde{x})$ qui suit un processus de Markov. Les équations Lagrangiennes couplées aux variables aléatoires $\xi_i(t)$ peuvent s'exprimer par:

$$\begin{cases} \frac{d\xi_i}{dt} = h_i(\widetilde{x}, t) + g_{ij}(\widetilde{x}, t) \eta_j(t) \\ \langle \eta_i(t') \eta_j(t'') \rangle = \delta_{ij} \delta(t' - t'') \end{cases}$$
(3.18)

On trouve alors pour équation (3.15) les tenseurs $D_i(\tilde{x};t)$ et $D_{ij}(\tilde{x};t)$ associés à l'équation de Fokker-Planck (3.17) (voir les détails dans la thèse de Michelot [50]), soit:

$$\begin{cases} h_i(\widetilde{x}, t) = -\frac{v_i}{T_L} \\ g_{ij}(\widetilde{x}, t) = \sigma_v \sqrt{\frac{2}{T_L}} \delta_{ij} \end{cases}$$
(3.19)

3.5.3 L'équation de Langevin en forme continue

Considérons une équation différentielle stochastique sur la vitesse de la forme:

$$du_{i} = a_{i}(X_{i}, u_{i}, t) dt + b_{i}(X_{i}, u_{i}, t) d\zeta_{i}$$
(3.20)

où ζ_i est une incrémentation gaussienne centrée de variance dt.

Le critère de mélange parfait, à savoir qu'une espèce A mélangée de façon homogène à un instant doit le rester, permet d'affirmer que la fonction de densité de distribution des particules marquées dans l'espace des phases $P_L(\tilde{x};t)$ et la fonction de densité de distribution des particules fluides $P_E(\tilde{x};t)$ vérifient la même équation d'évolution (l'équation de Fokker-Planck 3.17).

En outre, Thomson [17,51] montre que b doit vérifier

$$b_i^2 = C_0 \,\epsilon \tag{3.21}$$

où C_0 est la constante de Kolmogorov et ϵ la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Cette égalité est nécessaire pour que le modèle soit cohérent avec la théorie de la zone inertielle développée par Kolmogorov.

Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire, les particules se déplacent conformément à cette approche indépendamment les unes des autres. Ce modèle sera ainsi appelé modèle à une particule, et le système d'équation sera donc:

$$\begin{cases} dv_i = -\frac{C_0 \epsilon}{2 \sigma_{v_i}} v_i dt + \sqrt{C_0 \epsilon} d\zeta \\ \frac{dX_i}{dt} = v_i \end{cases}$$
(3.22)

On retrouve bien l'équation de Langevin pour la vitesse.

3.5.4 Le modèle de T_L et le paramètre C_0

Dans l'équation de Langevin, il faut faire attention à l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne T_L . Ce paramètre est très important pour bien prévoir le mouvement des particules. La définition de ce paramètre est:

$$T_L = \int_0^\infty R_L(t) dt \tag{3.23}$$

On ne peut pas obtenir cette valeur par intégration de la fonction de corrélation Lagrangienne pendant la simulation numérique, surtout pour le temps court. Il faut toutefois modéliser ce paramètre important pour résoudre l'équation de Langevin. Dans le chapitre 5, on va montrer que ce paramètre joue encore un rôle important dans le mélange turbulent et la dispersion d'un scalaire.

En effet, pour une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire, on a un modèle classique pour ce temps Lagrangien:

$$T_L = \frac{2\sigma_v^2}{C_0 \epsilon} \tag{3.24}$$

où C_0 est une constante, σ_v l'écart type de vitesse, et ϵ la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

La constante C_0 varie en fait de 2.0 à 10.0 selon des travaux différents. Par exemple: $C_0 = 2.0 \sim 3.0$ dans la thèse de Michelot [50]; Sawford [52], en utilisant les résultats des simulations numériques de Yeung [33], trouve que C_0 doit être égale à 7; Monin & Yaglom [13] proposent une valeur de 2.1; Yeung utilise C_0 est égale à 6.5 dans son étude [31]. Une comparaison menée par Du [53] entre les courbes de dispersion verticale d'une source ponctuelle dans une turbulence de grille obtenues par le modèle à deux échelles de temps de Sawford [52] et des mesures expérimentales conduit à préférer une valeur de 3.0 ± 0.5 . Il trouve qu'il y a une influence du nombre de Reynolds Re_{λ} sur cette constante C_0 .

De plus, Sawford [54] a proposé une formule pour modifier ce paramètre:

$$C_0 = \frac{\tilde{C}_0}{1 + 1.75 \,\tilde{C}_0^{\ 2} \, Re_\lambda^{-1.64}} \tag{3.25}$$

où $\tilde{C}_0 = 6.0$.

deux vérifications de C_0

Nous reviendrons sur le problème posé par cette 'constante' car, si c'est l'unique paramètre du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps, sa valeur exacte en est d'autant plus importante pour la justesse des résultats statistiques obtenus par simulation numérique. Nous avons vérifié la valeur de cette constante par deux approches:

1. On peut déterminer cette constante C_0 par les résultats statistiques de la simulation DNS.

$$C_0 = \frac{2\sigma_u^2}{T_L \epsilon} = \frac{4}{3T_L} \frac{k}{\epsilon}$$
(3.26)

Dans les trois tableaux ci-dessous (Tableau 3.1, 3.2 et 3.3), on montre les valeurs caractéristiques de l'énergie cinétique et la dissipation. L'échelle intégrale temporelle vient de l'intégration de la fonction de corrélation de vitesse Lagrangienne (équation 3.23) en DNS.

$Re_{\lambda} = 65$	k	ϵ	T_L	C_0
DNS 128^{3}	430	940	0.133	4.59

Tableau 3.1: calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 65$.

$Re_{\lambda} = 94$	k	ϵ	T_L	C_0
DNS 256^{3}	460	1000	0.129	4.75

Tableau 3.2: calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 94$.

$Re_{\lambda} = 135$	k	ϵ	T_L	C_0
DNS 256^{3}	480	1040	0.134	4.59

Tableau 3.3: calcul le paramètre C_0 . $Re_{\lambda} = 135$

2. On peut aussi déterminer C_0 par la fonction de structure Lagrangienne aux temps courts.

On utilise la fonction de structure temporelle Lagrangienne qui peut par ailleurs être écrite: (Monin et Yaglom [13]):

$$D_{ij}^{L}(t_{0},\tau) = \langle (v_{i}(t_{0}+\tau) - v_{i}(\tau))^{2} \rangle$$
(3.27)

où t_0 est le temps initial, τ l'intervalle de temps, et v_i la vitesse de la particule Lagrangienne.

En effet, pour un intervalle de temps τ tel que $\frac{1}{\tau}$ soit une fréquence située dans la zone inertielle, la fonction de structure temporelle Lagrangienne est égale à (Monin et Yaglom [13], Sawford [54]):

$$D_{ij}^L(\tau) = C_0 \,\epsilon(\tau) \,\delta_{ij} \qquad t_\eta \le \tau \le T_L \tag{3.28}$$

où t_{η} et T_L sont respectivement l'échelle de temps de Kolmogorov et l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne.

Dans les figures (3.1, 3.2, 3.3), on peut voir clairement que le modèle (Equation 3.28) décrit convenablement la fonction de structure Lagrangienne aux temps courts avec la constante C_0 valeur 3.6 ~ 4.3, qui est proche des résultats de DNS. Dans la suite, on fixe cette constante C_0 à une valeur de 4.5 dans le modèle donnant l'échelle de temps Lagrangienne T_L (Equation 3.57).



Figure 3.1: La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda}=65\,.$



Figure 3.2: La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 3.3: La fonction de structure Lagrangienne aux temps courts. $Re_{\lambda} = 135$.

3.5.5 Effets de non-stationnarité de la turbulence

Pour la turbulence homogène isotrope non-stationnaire, Thomson propose un terme d'évolution de la variance de la vitesse dans l'expression du paramètre a_i intervenant dans la partie déterministe du modèle stochastique à une particule et une échelle de temps. Il écrit:

$$a_{i}(t) = -\frac{1}{T_{L_{i}}(t)} + \frac{1}{2\sigma_{v_{i}^{2}}(t)} \frac{d\sigma_{v_{i}^{2}}(t)}{dt}$$
(3.29)

où T_{L_i} est modélisée par $\frac{2 \sigma_{v_i^2}(t)}{C_0 \epsilon}$.

Le système d'équation d'évolution de la vitesse peut alors s'écrire sous la forme:

$$\begin{cases} dX_i = v_i dt \\ dv_i = \left(-\frac{1}{T_{L_i}(t)} + \frac{1}{2\sigma_{v_i^2}(t)} \frac{d\sigma_{v_i^2}(t)}{dt} \right) v_i dt + \sqrt{C_0 \epsilon} d\zeta_i \end{cases}$$
(3.30)

Dans la turbulence homogène isotrope, il n'y a pas de direction privilégiée, on a donc:

$$\sigma_{v_1} = \sigma_{v_2} = \sigma_{v_3} = \sqrt{\frac{2}{3}k}$$
(3.31)

où k est l'énergie cinétique turbulente, $k = \frac{1}{2} \langle u_i u_i \rangle$. En outre, l'échelle de temps Lagrangienne est identique pour chaque composante de la vitesse des particules, et sont:

$$T_L = \frac{4}{3} \frac{k}{C_0 \epsilon} \tag{3.32}$$

On peut ainsi exprimer l'équation (3.30) en termes d'énergie cinétique turbulente k et de taux de dissipation de l'énergie ϵ :

$$\begin{cases} dX_i = v_i dt \\ dv_i = \left(\frac{1}{2k} \frac{dk}{dt} - \frac{3C_0\epsilon}{4k}\right) v_i dt + \sqrt{C_0\epsilon} d\zeta_i \end{cases}$$
(3.33)

3.6 Modèle stochastique en turbulence inhomogène

3.6.1 Etat de l'art avant 1987

Avant la présentation par Thomson [51] d'une étude générale rigoureuse du modèle à une particule et une échelle de temps, les formulations stochastiques Lagrangiennes en turbulence inhomogène se sont principalement inspirées du modèle obtenu en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire, et se sont limitées à des écoulements statistiquement stationnaires. On présente ici les différentes voies proposées avant 1987.

• Extension au cas inhomogène en rendant T_L et σ_u fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire: Hall [55], Reid [56], et Durbin [57]

$$u_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_L}\right) u_i^n + \sigma_{u_i} \sqrt{2\frac{\Delta t}{T_L}} \chi^{n+1}$$
(3.34)

avec χ^n variable gaussienne de variance Δt .

• Extension au cas inhomogène en rendant T_L et σ_u fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire et en y rajoutant des termes déterministes:

Suite au travail de Wilson [58], Legg [59] montrent à partir des équations de Navier-Stokes que, si l'on souhaite tenir compte des variations verticales de σ_w dans le cas d'une couche limite, il faut incorporer directement dans le modèle un terme déterministe où intervient explicitement le gradient de la variance de la vitesse. • Extension au cas inhomogène en rendant T_L et σ_u fonctions de la position dans le modèle obtenu en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire et en couplant les déplacements dans les différentes directions:

Ley [60], [61] propose, dans le cas d'une couche limite, une formulation stochastique bidimensionnelles suivant les directions (x'x) et (z'z). La partie aléatoire de l'équation donnant la vitesse longitudinale est corrélée à la partie aléatoire portant sur la vitesse verticale, et l'échelle de temps intégrale est fonction de la côté. Compte tenue des variations de σ_w avec z, ils arrivent à la même conclusion de Legg [59].

• Extension au cas inhomogène en supposant que la variable aléatoire, intervenant dans l'équation stochastique dévolution de la vitesse, suit une loi gaussienne centrée de variance Δt :

Van Dop [62] propose un modèle dans le cas d'une couche limite où la forme de la partie aléatoire est supposée connue. Il montre, en étudiant $\langle w \rangle$ et $\langle w^2 \rangle$ proche de la source, que pour des temps petits, l'équation de Langevin donnant l'évolution de la vitesse doit s'écrire:

$$dw = \left(-\frac{w}{\tau_L(z,t)} + a(z,t)\right) dt + b(z,t) d\zeta(t)$$
(3.35)

3.6.2 Modèle de Thomson (1987)

Aucune hypothèse n'est faite ici sur la nature de la turbulence. Par conséquent, aucune direction n'est privilégiée et la formulation est donc tridimensionnelle.

Le nombre de Reynolds sera toutefois suffisamment grand pour pouvoir faire l'hypothèse que le processus aléatoire donnant la position (\mathbf{X}, \mathbf{v}) du point dans l'espace des phases est markovien.

On suppose de plus que:

 $\bullet~{\bf X}$ et ${\bf v}$ sont des fonctions continues du temps avec

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{v} \tag{3.36}$$

• le processus à la même structure locale qu'un processus à incrémentations indépendantes.

ce processus peut alors être décrit par le système d'équations stochastiques:

$$\begin{cases} dX_i = v_i dt \\ dv_i = a_i(\mathbf{X}, \mathbf{v}, t) dt + b_{ij}(\mathbf{X}, \mathbf{v}, t) d\zeta_j \end{cases}$$
(3.37)

où le vecteur **a** et le tenseur **b** sont fonctions de **X**, **v** et t, et les incrémentations $d\zeta_j$ suivent une loi gaussienne centrée de variance dt et vérifient

$$\langle d\zeta_i \, d\zeta_j \rangle = \delta_{ij}(t) \, dt \tag{3.38}$$

La suite de raisonnement de Thomson s'appuie sur le critère simple du mélange parfait, à savoir qu'un mélange initialement homogène doit le rester. Il est important de noter que ce critère ne fait aucune hypothèse sur la turbulence, en particulier concernant la stationnarité.

Choix des paramètres a et b

Pour déterminer **b**, on considère la fonction de structure Lagrangienne:

$$D_{ij} = \langle (u_i(t+\tau) - u_i(t))(u_j(t+\tau) - u_j(t)) \rangle$$
(3.39)

Pour τ tel que $\frac{1}{\tau}$ soit une fréquence située dans la zone inertielle, on sait que:

$$D_{ij} = \delta_{ij} C_0 \epsilon \tau \tag{3.40}$$

où C_0 est la constante de Kolmogorov et ϵ la moyenne d'ensemble du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

L'équation différentielle

$$dv_i = a_i(\mathbf{X}, \mathbf{v}, t)dt + b_{ij}(\mathbf{X}, \mathbf{v}, t)d\zeta_j$$
(3.41)

issue de (3.37) conduit pour le modèle à:

$$D_{ij}^{model} = 2 \langle B_{ij} \rangle + O(\tau^2) \tag{3.42}$$

où **B** et le tenseur $\frac{1}{2}\mathbf{b}^t\mathbf{b}$.

Or le modèle de fonction de structure Lagrangienne D_{ij}^{model} est égal à la forme prise par la fonction de structure exacte dans la zone inertielle. Il doit donc y avoir égalité entre (3.40) et (3.42), ce qui conduit à:

$$2\left\langle B_{ij}\right\rangle = \delta_{ij} C_0 \epsilon \tag{3.43}$$

Thomson conclut qu'en l'absence de données ou d'une théorie permettant d'obtenir la

fonction \mathbf{B} , on prendra le modèle le plus simple possible. On choisit ainsi pour \mathbf{b} :

$$b_{ij} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \epsilon} \tag{3.44}$$

Pour le paramètre a_i , il vient:

$$a_i = \frac{3v_i}{2k} \left(\frac{1}{3}\frac{dk}{dt} - \frac{C_0 \epsilon}{2}\right) \tag{3.45}$$

où k est l'énergie cinétique turbulente, et $k = \frac{1}{2}u_i u_i$.

Le système d'équations pour la vitesse et la position dans une turbulence inhomogène décrit ainsi:

$$\begin{cases} dX_i = v_i dt \\ dv_i = \frac{3v_i}{2k} \left(\frac{1}{3}\frac{dk}{dt} - \frac{C_0\epsilon}{2}\right) dt + \sqrt{C_0\epsilon} d\zeta_i \end{cases}$$
(3.46)

3.6.3 Modèles différents

Pour le champ inhomogène, il n'a y pas de modèle dominant. Plusieurs modèles sont proposés par différents auteurs.

1. Iiopoulos [63] a utilisé une formulation modifiée de la dissipation d'énergie turbulente $\tilde{\epsilon}$ pour un écoulement inhomogène.

$$\widetilde{\epsilon} = \left[\frac{\overline{\partial u_i}}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - 2 \left(\frac{\partial \sqrt{k}}{\partial x_j} \right)^2 \right]$$
(3.47)

où l'inhomogénéité est dans la direction j.

2. Oesterlé [34] nous propose plusieurs modèles pour l'échelle temporelle Lagrangienne T_L dans le cas inhomogène, par exemple:

$$T_{ij}^{L} = C_L \,\frac{\langle \, u_i \, u_j \, \rangle}{\epsilon} \tag{3.48}$$

$$T_{ij}^{L} = C_{L} \, \frac{\langle u_{i}^{2} \rangle + \langle u_{j}^{2} \rangle}{2 \,\epsilon} \tag{3.49}$$

où la constante C_L est égale à $0.2 \sim 0.24$.

3.7 Application du modèle stochastique aux vitesses de sous-maille

A la lumière des précédentes modélisations stochastiques d'un champ turbulent, admettant que le champ de vitesse de sous-maille est un processus de Markov, nous allons appliquer cette méthode pour modéliser le champ Lagrangien des vitesses de sous-maille.

D'abord, on va présenter une relation entre la vitesse Lagrangienne d'une particule $v_i(t|X_0, t_0)$ et la vitesse Eulérienne $u_i(X(t|X_0, t_0), t)$, qui est la valeur instantanée dans un écoulement turbulent, et est solution de l'équation de Navier-Stokes.

Le raisonnement de Van Dop [62] consiste à rappeler qu'au temps initial t_0 et à la position initiale x_{i0} de l'endroit où se situe la particule, il y a une égalité exacte entre la vitesse Eulérienne et la vitesse Lagrangienne et le même pour les accélérations:

$$v_i(t_0) = u_i(x_{i0}, t_0) \tag{3.50}$$

$$\left(\frac{dv_i}{dt}\right)_{t_0} = \left(\frac{du_i}{dt}\right)_{(x_{i0},t_0)} \tag{3.51}$$

$$v_i(t|X_0, t_0) = u_i(X(t|X_0, t_0), t)$$
(3.52)

En LES, on filtre le champ de vitesse en séparant les échelles spatiales:

$$u_i(x, y, z, t) = u_i^{<}(x, y, z, t) + u_i^{>}(x, y, z, t)$$
(3.53)

On peut aussi séparer la vitesse des particules Lagrangienne, comme en description Eulérienne, en deux parties: celle des grandes échelles et celle des petites échelles:

$$v_i(t|X_0, t_0) = v_i^{<}(t|X_0, t_0) + v_i^{>}(t|X_0, t_0)$$
(3.54)

On fait l'hypothèse que les deux champs de vitesses des grandes échelles, Eulérien et Lagrangien, sont les mêmes, soit:

$$v_i^{<}(t|X_0, t_0) = u_i^{<}(X(t|X_0, t_0), t)$$
(3.55)

La vitesse Lagrangienne des petites échelles $v_i^>(t|X_0, t_0)$ doit être déterminée. On va appliquer les équations de Langevin et le modèle à une particule aux fluctuations de vitesse des petites échelles.

3.7.1 Formulation du modèle

Selon les équations de Langevin en formulation discrète, on peut écrire le mouvement et la vitesse des petites échelles des particules sous la forme:

$$\begin{cases} X_{i}^{>n+1} = \frac{v_{i}^{>n} + v_{i}^{>n+1}}{2} \Delta t \\ v_{i}^{>n+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{T_{L}^{>}}\right) v_{i}^{>n} + \sigma_{v^{>}} \sqrt{\frac{\Delta t}{T_{L}^{>}}} \left(2 - \frac{\Delta t}{T_{L}^{>}}\right) \xi^{n+1} \end{cases}$$
(3.56)

où $v_i^{>n}$ et $v_i^{>n+1}$ sont respectivement la vitesse de particule Lagrangienne des petites échelles à l'instant $n\Delta t$ et à l'instant prochain $(n+1)\Delta t$. L'échelle de temps Lagrangienne de sous-maille est donnée par:

$$T_L^> = \frac{2\,\sigma_{v^>}^2}{C_0\,\epsilon^>} \tag{3.57}$$

où $\sigma_u^>$ est l'écart type de vitesse des petites échelles, et $\epsilon^>$ la dissipation réalisée dans la zone des petites échelles.

3.7.2 Détermination des grandeurs de sous-maille

Energie moyenne des petites échelles E_{sg}

Evaluation globale dans l'espace spectral

Pour déterminer le paramètre $\sigma_{v>}$, on peut d'abord calculer l'énergie résiduelle de sous-maille E_{sg} (en anglais, c'est *subgrid energy*). Naturellement, dans la simulation des grandes échelles, l'énergie totale peut être décomposée en deux parties: l'une pour les grandes échelles, et l'autre pour les petites (figure 3.4).

$$E_{totale} = E_{grande} + E_{sg} \tag{3.58}$$

Selon la loi de Kolmogorov de 1941 (Lesieur [15]), le spectre de l'énergie cinétique d'une turbulence homogène isotrope à grand nombre de Reynolds, décroît en suivant une



Figure 3.4: Décomposition d'énergie cinétique de la turbulence.

loi de $k^{-5/3}$ jusqu'à la fin. On peut écrire celui-ci sous la forme:

$$E(k) = C_k \ \epsilon^{2/3} \ k^{-5/3} \tag{3.59}$$

On peut alors approximer l'énergie résiduelle de sous-maille sous la forme:

$$E_{sg} = \int_{k_c}^{\infty} C_k \ \epsilon^{2/3} \ k^{-5/3} dk \tag{3.60}$$

$$E_{sg} = \frac{3}{2} E(k_c) k_c$$
 (3.61)

où k_c est le nombre d'onde de coupure.

En réalité, dans la zone des plus petites échelles, le spectre décroît plus vite que la pente en -5/3 (figure 3.5). On a en fait approximé le calcul jusqu'à l'échelle de Kolmogorov en écrivant:

$$E_{sg} = \int_{k_c}^{k_{\eta}} C_k \ \epsilon^{2/3} k^{-5/3} dk \tag{3.62}$$

où k_η est le nombre d'onde de Kolmogorov, et η l'échelle de Kolmogorov :



Figure 3.5: Représentation des zones d'interaction entre échelles résolues et échelles sousmaille.

$$k_{\eta} = \frac{\pi}{\eta} \tag{3.63}$$

Enfin, on dispose de l'énergie de sous-maille, qui est une valeur statistique moyenne dans tous les domaines:

$$E_{sg} = \frac{3}{2} [E(k_c) k_c - E(k_\eta) k_\eta]$$

= $\frac{3}{2} C_k \epsilon (k_c^{-2/3} - k_\eta^{-2/3})$ (3.64)

On rappelle que l'énergie de sous-maille E_{sg} évaluée de cette façon est une valeur moyenne statistique uniforme dans tout le domaine physique. Elle est adaptée à des méthodes numériques spectrales.

Evaluation locale de l'énergie de sous-maille dans l'espace physique

Dans la pratique, les LES sont souvent réalisées dans l'espace physique. Nous ne disposons pas en général d'informations spectrales. De plus, dans le but d'utiliser une information locale, c.à.d dépendant de la position spatiale, nous employons une méthode d'évaluation de l'énergie de sous-maille, indépendante du modèle de sous-maille utilisé pour la résolution du champ Eulérien en LES. Une équation de transport de l'énergie de sous-maille est alors utilisée.

Une équation dynamique pour l'énergie cinétique de sous-maille E_{sg} peut décrire: (Sagaut [8]):

$$\frac{\partial E_{sg}}{\partial t} + \frac{\partial (u_j^{\leq} E_{sg})}{\partial x_j} = -\tau_{ij} S_{ij}^{\leq} - C_1 \frac{(E_{sg})^{3/2}}{\triangle} + C_2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\triangle \sqrt{E_{sg}} \frac{\partial E_{sg}}{\partial x_j} \right) + \nu \frac{\partial^2 E_{sg}}{\partial x_j \partial x_j} \quad (3.65)$$

où $C_1 = 1.0$ et $C_2 = 0.1$ sont deux constantes positives pour l'écoulement homogène isotrope (Yoshizawa [64], Horiuti [65] et Deardorff [66]). $u_j^{<}$ est la composante de la vitesse associée aux grandes échelles. Dans ce travail, la taille de filtre est telle que $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta$, où

$$\triangle = \frac{L}{N}$$

L est la longueur de boîte et N le nombre de discrétisation dans une direction.

Le tenseur de sous-maille τ_{ij} prend la forme:

$$\tau_{ij} = (u_i u_j)^< - u_i^< u_j^< \tag{3.66}$$

Un modèle de calcul de τ_{ij} s'écrit:

$$\tau_{ij} = -2\nu_t S_{ij}^{<} \tag{3.67}$$

Le tenseur des déformations locales pour les grandes échelles, $S_{ij}^{<}$, est de la forme:

$$S_{ij}^{<} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^{<}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{<}}{\partial x_i} \right)$$
(3.68)

Les différents termes dans l'équation (3.65) représentent respectivement: l'évolution de l'énergie de sous-maille en temps; l'advection par les modes résolus; la production par les modes résolus; la dissipation turbulente; la diffusion turbulente et la dissipation visqueuse.

On utilise le schéma de Runge-Kutta en l'ordre 2 en temps, et dans l'espace spectral pour la partie spatiale.

Deardorff [67] a développé un autre modèle pour résoudre l'équation d'évolution de l'énergie de sous-maille en 1980. Nous avons comparé les deux modèles. La différence des résultats obtenus par les deux méthodes est négligeable. Dans la suite, l'équation (3.65) est retenues pour l'évaluation de l'énergie de sous-maille dans toutes les simulations en LES.

Dissipation d'énergie dans le domaine des petites échelles

La dissipation de l'énergie de sous-maille est proposée par le modèle ci-dessous (Deardorff [67], Sagaut [8]):

$$\epsilon^{>} = C_{\epsilon} \frac{E_{sg}^{\frac{3}{2}}}{\Delta} \tag{3.69}$$

où E_{sm} est l'énergie de sous-maille. La constante C_{ϵ} , pour le cas d'une turbulence homogène, est telle que $C_{\epsilon} = 0.7$ dans l'étude de Deardorff [67], et $C_{\epsilon} = 1.0$ dans la recherche de Sagaut [8]. Dans ce travail, on utilise le paramètre de Sagaut, c'est-à-dire $C_{\epsilon} = 1.0$ dans la suite. Δ est la taille de maille, $\Delta = \frac{L}{N}$, L est la longueur de la boîte, et N est le nombre de maille dans une direction.

Puisque $E_{sg} = \frac{3}{2} \sigma_{v^{>}}^2$, la dissipation de sous-maille est donc ainsi:

$$\epsilon^{>} = C_{\epsilon} \frac{\left(\frac{3}{2}\sigma_{v^{>}}^{2}\right)^{3/2}}{\Delta}$$

$$= 1.84 \frac{\sigma_{v^{>}}^{3}}{\Delta}$$
(3.70)

3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté:

- Le mouvement des particules des fluides et l'équation de Langevin.

- Le modèle stochastique de l'équation de Langevin à une particule et à une échelle de temps.

- Le modèle d'échelle intégrale temporelle Lagrangienne ${\cal T}_L$ et la détermination de la constante ${\cal C}_0$.

- L'application du modèle stochastique à l'échelle de sous-maille, la modélisation stochastique du champ Lagrangien de vitesse de sous-maille, et le choix des paramètres.

Chapitre 4

LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille

Nous avons présenté dans le chapitre précédent le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, et le choix des paramètres. Dans ce chapitre, nous utiliserons la Simulation des Grandes Echelles pour simuler les champs de vitesse Eulérienne. Le champ Lagrangien complet est ensuite reconstitué avec le modèle stochastique de sous-maille. Nous comparerons les résultats avec la Simulation Numérique Directe. Nous caractériserons l'influence de ce modèle stochastique Lagrangien en LES, à partir des grandeurs caractéristiques de la turbulence telles que:

- La corrélation de la vitesse en un-point en deux-temps.
- L'échelle intégrale temporelle.
- La fonction de structure Lagrangienne à temps court.
- Le déplacement moyen et la dispersion des particules.

4.1 Conditions de Calcul

Pour analyser l'influence du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, nous nous plaçons dans les mêmes situations physiques que celles du chapitre 2. Nous avons réalisé les simulations LES dans un écoulement homogène isotrope statistiquement stationnaire, ainsi que dans un écoulement homogène isotrope instationnaire. Les résultats sont ensuite comparés à ceux de DNS.
4.2 Influence du modèle de sous-maille sur les corrélations de la vitesse en un-point et en deux-temps

On discute ici des corrélations de la vitesse Lagrangienne en un-point en deux-temps. L'importance de cette quantité sur le mélange Lagrangien a été discutée auparavant dans le chapitre 2.

4.2.1 Cas de turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire

A l'instant $t = t_0$, à cause de la méthode de création du champ turbulent initial qui utilise les phases aléatoires, le transfert d'énergie entre différentes échelles n'est pas établi. Afin d'écarter toute l'influence liée à la condition initiale de simulation, nous avons choisi une turbulence statistiquement stationnaire par une action de forces dans les grandes échelles.

Influence de l'évaluation du temps Lagrangien du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille

Nous comparons le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille avec deux approches pour le calcul du temps caractéristique Lagrangien: l'approche locale (dynamique) et l'approche où T_L est statistiquement moyenné.

• Approche dynamique

Pour chaque particule, on utilise le temps Lagrangien lié à sa position spatiale instantanée.

$$T_L^>(x, y, z) = \frac{4}{3C_0} \frac{k^>(x, y, z)}{\epsilon^>(x, y, z)}$$
(4.1)

où $k^{>}(x, y, z)$ et $\epsilon^{>}(x, y, z)$ sont l'énergie cinétique autour de la particule et la dissipation locale des petites échelles.

• Approche où T_L est statistiquement moyenné

Dans ce cas, on a la même valeur de l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne pour toutes les particules, dans tout l'espace.

$$T_L^> = \frac{4}{3C_0} \frac{\langle k^> \rangle}{\langle \epsilon^> \rangle} \tag{4.2}$$



Figure 4.1: Corrélation de la vitesse Lagrangienne. La figure de droite concerne les temps courts. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 94$.

Sur la figure 4.1, les résultats de corrélation de vitesse Lagrangienne sont tracés pour quatre simulations : DNS, LES sans le modèle Lagrangien de sous-maille, LES avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille avec deux méthodes d'évaluation du temps caractéristique ($T_L^>$). Le modèle de sous-maille utilisé pour la résolution du champ Eulérien est celui de Chollet-Lesieur.

En premier lieu, il apparaît que la corrélation de vitesse Lagrangienne obtenue en LES, est plus proche de celle de DNS, quand le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille est employé. L'apport du modèle Lagrangien de sous-maille est claire et net aux temps courts (pour $t/T_L < 2$). Notons aussi que l'utilisation de deux méthodes, 'dynamique' ou 'statistiquement moyenné', pour calculer le temps caractéristique du modèle Lagrangien de sous-maille, $T_L^>$, donne peu de différence sur le résultat. Le modèle de sous-maille utilisé pour la résolution Eulérienne est celui de Chollet-Lesieur.



Figure 4.2: Corrélation de la vitesse Lagrangienne. La figure de droite concerne les temps courts. Cas A_2 , LES 64^3 , modèle de sous-maille de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94$.

Quand le modèle de sous-maille de Cui-Shao est employé pour la résolution Eulérienne en LES, l'amélioration du résultat avec le modèle Lagrangien de sous-maille est aussi manifesté sur la figure (4.2). Par contre, il y a une différence entre l'utilisation du temps 'dynamique' ou du temps 'statistiquement moyenné'. Le résultat avec l'emploi du temps 'dynamique' est plus proche du résultat de DNS.

Dans la suite, on ne considère que le temps 'dynamique' du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, pour les deux modèles de sous-maille, celui de Chollet-Lesieur et celui de Cui-Shao.

Apport du modèle de sous-maille stochastique Lagrangien

Dans ce paragraphe, on va comparer l'apport de la modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille, sur les corrélations de vitesse Lagrangienne. Les résultats de DNS servent de référence pour examiner les résultats de LES. La turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire sera retenue.

Sur les figures (4.3, 4.4, 4.5, 4.6, 4.7, 4.8), nous avons tracé la corrélation de vitesse Lagrangienne pour trois nombres de Reynolds $Re_{\lambda} = 65$, 94, 135, avec le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur et celui de Cui-Shao. Les LES sont effectuées en maillages 64^3 . Les figures de gauche sont pour les temps longs, et celle de droite pour les temps courts.



Figure 4.3: Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne les temps longs, et celle de droite les temps courts. Cas A_1 , LES 64^3 , modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 65$.

Nous constatons qu'il y a une amélioration importante en ajoutant le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille. Les corrélations de vitesse Lagrangienne en deux-temps obtenues avec la prise en compte des fluctuations de sous-maille par le modèle stochastique sont plus proches du résultat de la DNS dans les trois cas avec des nombres de Reynolds



Figure 4.4: Corrélation de vitesse Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 65$.



Figure 4.5: Corrélation de vitesse Lagrangienne. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 4.6: Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=94\,.$



Figure 4.7: Corrélation de vites se Lagrangienne. Modèle de Chollet-Lesieur. $Re_{\lambda}=135$.



Figure 4.8: Corrélation de vitesse Lagrangienne. Modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda}=135\,.$

différents. A temps court $t \leq 2T_L$, cette amélioration est très significative quand on compare au résultat de DNS.

Influence de la résolution numérique en LES

Dans ce paragraphe, on analyse et on compare l'influence du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille sur la corrélation de vitesse Lagrangienne pour des résolutions numériques spatiales différentes.

Dans un premier temps, on présente les résultats de LES effectués avec un maillage comportant 32^3 et les comparaisons avec les résultats de DNS. Les courbes de corrélation de vitesse Lagrangienne sont tracées sur les figures (4.9, 4.10, 4.11) pour les trois nombres de Reynolds considérés.



Figure 4.9: Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 65$.

Nous avons trouvé que, en LES avec un maillage de 32^3 , l'influence du modèle stochastique de sous-maille sur la corrélation de vitesse Lagrangienne est importante, et il apparaît en particulier une nette amélioration aux temps courts. Avec l'augmentation du nombre de Reynolds, l'amélioration est également plus importante.

De plus, les figures nous montrent que le résultat du modèle de sous-maille de Cui-Shao est légèrement meilleurs que ceux du modèle de Chollet-Lesieur avec un maillage de 32^3 . Notons que pour un maillage de 64^3 , les différences de deux différents modèles de sous-maille, utilisés pour la résolution du champ Eulérien, sont petites. Cela signifie qu'avec le modèle de Cui-Shao, les champs Lagrangiens reconstitués avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, sont moins sensibles ou prennent mieux en compte l'effet de résolution spatiale.

Dans un deuxième temps, une comparaison des corrélations de vitesse Lagrangienne par LES entre deux maillages différents, 64^3 et 32^3 , effectuée avec le modèle stochastique



Figure 4.10: Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 94$.



Figure 4.11: Corrélation de vitesse Lagrangienne. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite le modèle de Cui-Shao. $Re_{\lambda} = 135$.



Lagrangien de sous-maille. Les résultats sont présentés sur les figures (4.12, 4.13 et 4.14).

Figure 4.12: Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao.



Figure 4.13: Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} =$ 94. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao.

Nous avons trouvé que la résolution spatiale joue un rôle important. Si nous augmentons la résolution spatiale, avec un maillage plus fin, les résultats sont plus proches de ceux de la DNS. Avec le maillage 64^3 , le temps de calcul est 16 fois que celui du maillage de 32^3 . Il faudra ainsi veiller à conserver un compromis entre précision et temps de calcul.

De plus, la différence sur la corrélation de vitesse Lagrangienne est importante en 64^3 et en 32^3 avec le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur. Les résultats se dégradent en résolution grossière. Par contre, le modèle de Cui-Shao donne dans les deux cas (32^3 et 64^3), des résultats comparables.



Figure 4.14: Corrélation de vitesse Lagrangienne en résolution spatiale différentes. $Re_{\lambda} = 135$. La figure de gauche concerne le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite celui de Cui-Shao.

Influence du nombre de Reynolds Re_{λ}

Dans ce paragraphe, nous examinons l'influence de nombre de Reynolds sur la corrélation de vitesse. Bien que nous n'ayons pas une grande variation de ce nombre, à cause de la limitation de résolution en DNS, une tendance qualificative peut être dégagée.

La figure (4.15) donne la corrélation de vitesse Eulérienne en DNS, la figure (4.16) présente la corrélation Lagrangienne en DNS. Les figures (4.17 et 4.18) montrent les corrélations de vitesse Lagrangienne en LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien.



Figure 4.15: Corrélation de vitesse Eulérienne en DNS. La figure de droite correspond aux temps courts.

Sur ces figures, nous avons constaté que, aussi bien en DNS qu'en LES, l'influence du



Figure 4.16: Corrélation de vitesse Lagrangienne en DNS. La figure de droite correspond aux temps courts.



Figure 4.17: Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES combinée avec le modèle stochastique Lagrangien. Modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur. La figure de droite correspond aux temps courts.



Figure 4.18: Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES combinée avec le modèle stochastique Lagrangien. Modèle de sous-maille de Cui-Shao. La figure de droite correspond aux temps courts.

nombre de Reynolds sur la corrélation de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, se manifeste aux temps courts, $t \leq T_E$ pour la corrélation Eulérienne et $t \leq T_L$ pour la corrélation Lagrangienne. Quand le nombre de Reynolds augmente, la décroissance de la corrélation de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, est plus rapide.

On a aussi trouvé que la différence, pour les trois nombres de Reynolds, sur les corrélation de vitesse Lagrangienne n'est pas aussi importante que sur la corrélation de vitesse Eulérienne. Ces résultats signifient que la corrélation Lagrangienne est moins sensible au nombre de Reynolds que la corrélation Eulérienne.

4.2.2 Turbulence homogène isotrope en décroissance

Dans cette partie, nous considérons une turbulence homogène isotrope en décroissance. Ainsi, on n'ajoute plus l'action de la force extérieure sur les grandes échelles de la turbulence. Le champ de vitesse initial et le temps initial pour commencer à lancer les particules sont commentés dans le chapitre 2.

Les résultats sont présentés sur les figures (4.19, 4.20). Comme dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire, nous constatons que, si nous ajoutons le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, les résultats sont plus proches de ceux de la DNS. On peut dire que le modèle stochastique de Langevin fonctionne aussi bien pour la turbulence statistiquement stationnaire que pour la turbulence en décroissance.



Figure 4.19: Corrélation de vitesse Lagrangienne en LES. Cas B_2 , LES $\,64^3\,,\ Re_\lambda=94\,.$ Modèle de sous-maille de Cui-Shao.



Figure 4.20: Corrélation de vitesse Lagrangienne dans la turbulence homogène isotrope en décroissance en LES 64^3 . Modèle de Cui-Shao. La figure de gauche correspond à $Re_{\lambda} = 65$, et celle de droite à $Re_{\lambda} = 135$.

4.3 Echelle intégrale temporelle Lagrangienne T_L

4.3.1 L'échelle T_L en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire

Dans le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, le paramètre constitué par l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne T_L est très important pour bien prévoir les mouvements des particules. Cette quantité a aussi une importance fondamentale dans la modélisation de la dispersion de scalaire ou du mélange turbulent de différentes espèces (Michelot [50], Yeung [32] et Reynolds [68]). L'échelle intégrale temporelle peut ainsi être considérée comme une clé de la modélisation dans ce contexte!

Dans cette partie, on étudie le comportement de ce temps dans la turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire. On dispose de deux approches pour calculer l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne: l'une est consiste en l'intégration directe de la courbe de corrélation de vitesse Lagrangienne, et l'autre résultat d'un modèle classique.

Calcul par l'intégration de la corrélation de vitesse



Figure 4.21: Echelle intégrale temporelle Lagrangienne. Cas A_2 , $Re_{\lambda} = 94$. La figure de gauche correspond au modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao.

Sur la figure (4.21), est tracée l'évolution de l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne. Avec le modèle de stochastique, il y a une amélioration dès le départ de la simulation. Et, après 0.5 seconde ($4T_L$), le résultat de DNS est stable: $T_L = 0.121$ s (par l'intégration jusqu'à $4T_L$) et $T_L = 0.129$ s (jusqu'à $12T_L$). Dans le tableau (4.1), les échelles intégrales temporelles obtenues par intégration de la corrélation de vitesse Lagrangienne (jusqu'à $4T_L$) dans les cas de nombres de Reynolds différents sont données au travers trois simulations différentes: en DNS et en LES couplée ou non avec le modèle stochastique Lagrangien.

	$T_L \ (Re_\lambda = 65)$	$T_L \ (Re_\lambda = 94)$	$T_L \ (Re_\lambda = 135)$
DNS	0.129	0.121	0.126
LES 64^3 (CH-L)	0.163	0.156	0.161
LES 64^3 (C-SH)	0.163	0.154	0.164
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.153	0.144	0.146
LSS 64^3 (C-SH+Sto.)	0.153	0.145	0.148
LES 32^3 (CH-L)	0.207	0.206	0.210
LES 32^3 (C-SH)	0.191	0.172	0.154
LES 32^3 (CH-L+Sto.)	0.180	0.177	0.180
LES 32^3 (C-SH+Sto.)	0.167	0.153	0.133

Tableau 4.1: Echelle intégrale temporelle Lagrangienne obtenue par intégration des corrélations de vitesse dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire. 'CH-L' modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur; 'C-SH' modèle de sous-maille de Cui-Shao; 'Sto.' indique le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille.

Calcul par le modèle classique

Les résultats issus du modèle classique qui fournit:

$$T_L = \frac{4}{3C_0} \frac{k}{\epsilon} \tag{4.3}$$

sont donnés sur les tableaux (4.2, 4.3 et 4.4), en comparant au temps Lagrangien obtenu par intégration des corrélations de vitesse.

$Re_{\lambda} = 65$	T_L (M)	k	ϵ
DNS	0.136	430	940
LES 64^3 (CH-L)	0.130	405	920
LES 64^3 (C-SH)	0.131	410	930
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.138	430	920
LES 64^3 (C-SH+Sto.)	0.139	435	930

Tableau 4.2: Echelle intégrale temporelle issue du modèle dans une turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 65$. $T_L(M)$ est la valeur modélisée par l'équation (3.57); k représente l'énergie cinétique et ϵ est le taux de dissipation.

Les résultats font ressortir les points suivants:

$Re_{\lambda} = 94$	T_L (M)	k	ϵ
DNS	0.136	460	1000
LES 64^3 (CH-L)	0.129	410	945
LES 64^3 (C-SH)	0.130	415	950
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.143	455	945
LES 64^3 (C-SH+Sto.)	0.142	455	950

Tableau 4.3: Echelle intégrale temporelle obtenue par le modèle en turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 94$.

$Re_{\lambda} = 135$	T_L (M)	k	ϵ
DNS	0.137	480	1040
LES 64^3 (CH-L)	0.127	415	970
LES 64^3 (C-SH)	0.125	415	980
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.139	455	970
LES 64^3 (C-SH+Sto.)	0.136	450	980

Tableau 4.4: Echelle intégrale temporelle obtenue par le modèle en turbulence homogène isotrope et stationnaire pour $Re_{\lambda} = 135$.

- En DNS, l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne a des valeurs quasi identiques quand elle est obtenue par intégration directe de la corrélation de vitesse (jusqu'à $10T_L$) et par le modèle classique (tableau 4.5).

Re_{λ}	T_L (I)	T_L (M)
65	0.133	0.136
94	0.129	0.136
135	0.134	0.137

Tableau 4.5: Echelle intégrale temporelle en turbulence homogène isotrope et stationnaire. T_L (I) indique le résultat de l'intégration de la corrélation; T_L (M), celui du modèle.

- En LES sans modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, le temps Lagrangien n'est pas identique pour les deux approches. D'une part, le résultat obtenu par intégration directe de la corrélation de vitesse a une grande valeur en LES par rapport à celle de DNS puisque la LES ne tient pas compte du comportement des petites échelles, et la décroissance de la corrélation des vitesses des grandes échelles est relativement plus lente que celle des petites échelles. En ajoutant le modèle stochastique, le temps Lagrangien est proche du résultat de DNS obtenu par intégration de la corrélation de vitesse. Il y a environ 10% d'amélioration en LES 64³ et 25% en LES 32³. L'effet du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, en détruisant la corrélation des petites échelles, est significatif. L'amélioration est plus importante quand la résolution numérique est grossière (32^3).

Enfin, le résultat par le modèle classique de T_L en LES, sans modèle stochastique de

sous-maille, est un peu plus petit que celui issu de la DNS. Quand le modèle stochastique est utilisé, le temps Lagrangien est un peu plus grand que celui de la DNS. Cela signifie que la LES a bien simulée les grandeurs caractéristiques de la turbulence, et que nos résultats sont fiables.

Relation enter T_L et T_{Λ}

Dans le tableau (4.6), on montre le rapport $R = \frac{T_L}{T_\Lambda}$ entre les deux temps caractéristiques: le temps Lagrangien et le temps de vie des gros tourbillons. Quand le modèle stochastique est utilisé dans la simulation, ce rapport est proche du résultat de la DNS.

	$R (Re_{\lambda} = 65)$	$R (Re_{\lambda} = 94)$	$R (Re_{\lambda} = 135)$
DNS	0.632	0.637	0.708
LES 64^3 (CH-L)	0.744	0.743	0.763
LES 64^3 (C-SH)	0.745	0.740	0.785
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.699	0.686	0.692
LES 64^3 (C-SH+Sto.)	0.705	0.697	0.708

Tableau 4.6: Rapport entre l'échelle de temps Lagrangienne et l'échelle temporelle des grandes structures.

4.3.2 L'échelle T_L dans une turbulence homogène isotrope en décroissance

Dans le tableau (4.7), les échelles intégrales temporelles obtenues par intégration de la corrélation de vitesse Lagrangienne (jusqu'à $4T_L$) pour les différents nombres de Reynolds sont données au travers trois simulations différentes: en DNS et en LES couplée ou non avec le modèle stochastique Lagrangien.

	$T_L \ (Re_\lambda = 65)$	$T_L \ (Re_\lambda = 94)$	$T_L \ (Re_{\lambda} = 135)$
DNS	-	0.134	-
LES 64^3 (CH-L)	0.203	0.192	0.189
LES 64^3 (C-SH)	0.199	0.186	0.193
LES 64^3 (CH-L+Sto.)	0.186	0.175	0.170
LSS 64^3 (C-SH+Sto.)	0.183	0.169	0.173

Tableau 4.7: Echelle intégrale temporelle Lagrangienne obtenue par intégration de la corrélation de vitesse en turbulence homogène isotrope en décroissance.

En ajoutant le modèle stochastique, le temps de décorrélation diminue. Par rapport à la turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire, les échelles intégrales temporelles Lagrangiennes de la turbulence en décroissance sont plus grandes.

4.4 Fonction de structure temporelle Lagrangienne

Afin d'étudier l'influence du modèle stochastique de sous-maille sur le champ de vitesse Lagrangien, nous avons examiné la fonction de structure temporelle Lagrangienne. Dans le cadre Eulérienne, on peut définir la fonction de structure temporelle Eulérienne sous la forme:

$$D_E(\tau) = \left\langle \left(u_i(t+\tau) - u_i(t) \right)^2 \right\rangle \tag{4.4}$$

De la même manière, on peut obtenir la fonction de structure temporelle Lagrangienne sur trajectoire de particule par:

$$D_L(\tau) = \langle (v_i(t+\tau) - v_i(t))^2 \rangle$$
(4.5)

où $v_i(t)$ est la vitesse Lagrangienne de la particule.

Sur les figures (4.22) et (4.23), les fonctions de structure temporelles Lagrangiennes, pour deux nombres de Reynolds différents, sont tracées. Les figures de gauche correspondent aux LES réalisées avec le modèle de sous-maille de Chollet-Lesieur, et celles de droite avec celui de Cui-Shao. Nous avons comparé les résultats de DNS, LES et LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille.



Figure 4.22: Fonction de structure Lagrangienne. $Re_{\lambda} = 94$, $T_L = 0.129(s)$. La figure de gauche correspond au modèle de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao.



Figure 4.23: Fonction de structure Lagrangienne. $Re_{\lambda} = 135$, $T_L = 0.134(s)$. La figure de gauche correspond au modèle de Chollet-Lesieur, et celle de droite à celui de Cui-Shao.

Nous pouvons constater qu'il y a une nette amélioration de la fonction de structure temporelle Lagrangienne pour les temps courts ($t \leq T_L$) pour les deux modèles de sous-maille utilisés en résolution Lagrangienne. En temps long, le modèle stochastique Lagrangien n'apporte pas d'amélioration. On peut aussi noter que dans le cas du modèle de sous-maille de Cui-Shao, les fonctions de structure temporelles Lagrangiennes sont plus proches de celles de la DNS.

4.5 Déplacement et dispersion des particules en turbulence homogène isotrope statistiquement stationnaire

On étudie ici l'influence de la modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille sur le déplacement moyen des particules.

Monin et Yaglom [13] nous donnent une définition du déplacement des particules. Pour la particule p1, par exemple, qui se trouve à $X(t_0)$ à l'instant initial $t = t_0$, l'accroissement de déplacement entre t et t + dt (dt est un petit intervalle de temps) est:

$$dY = X(t + dt; t_0, X(t_0)) - X(t; t_0, X(t_0)) = V(t; t_0, X(t_0)) dt$$
(4.6)

Le déplacement de cette particule peut être écrit sous la forme:

$$Y(\tau) = \int_{t=t_0}^{t=t_0+\tau} dY = \int_{t=t_0}^{t=t_0+\tau} V(t;t_0,X(t_0)) dt$$
(4.7)

Le déplacement moyen de toutes les particules est:

$$\overline{Y}(\tau) = \int_{t=t_0}^{t=t_0+\tau} \langle V(t;t_0,X(t_0)) \rangle_L dt$$
(4.8)

où $\langle \rangle$ indique la moyenne Lagrangienne pour toutes les particules. Dans notre cas statistiquement homogène, isotrope et stationnaire, $\langle V(t;t_0,X(t_0))\rangle_L = 0$, donc $\overline{Y}(\tau)$ reste nul.

On peut définir la dispersion des particules par:

$$\overline{X}(t) = rms(X(t)) = \sqrt{\langle (X(t;t_0, X(t_0)) - X(t_0))^2 \rangle_L}$$
(4.9)

où $X(t_0)$ est la position initiale de la particule fluide à l'instant initial t_0 , $X(t; t_0, X(t_0))$ est la position de la même particule à l'instant t.

La forme théorique classique pour le cas statistiquement stationnaire est (Monin & Yaglom [13]):

$$\begin{cases} \overline{X}(t) = \sigma_v t ; & (t \ll T_L) \\ \overline{X}(t) = \sigma_v \sqrt{2T_L t} ; & (t \gg T_L) \end{cases}$$

$$(4.10)$$

où σ_v est l'écart type de la vitesse des particules, et T_L l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne.

On présente la dispersion des particules à temps court sur la figure (4.24). Le résultat de simulation numérique est en bon accord avec l'analyse théorique.

Sur les figures (4.25, 4.26), les résultats d'évolution de rms(X) sont tracés. La figure (4.25) correspond au nombre de Reynolds $Re_{\lambda} = 94$, et la figure (4.26) à $Re_{\lambda} = 65$. Nous pouvons constater qu'aussi bien pour les temps longs que pour les temps courts, la dispersion des particules est reproduite avec fidélité par la simulation des grandes échelles.

Pour les temps courts, $t \leq T_L$, la courbe théorique est très proche des résultats de simulation. En outre, la différence entre les deux simulations des grande échelles, sans ou avec le modèle stochastique de Langevin, reste très petite.

Pour les temps longs, $t \geq 10T_L$, la dispersion des particules est progressivement améliorée en ajoutant le modèle stochastique de sous-maille. Cette amélioration est plus claire pour le cas où nombre de Reynolds Re_{λ} est le plus grand.



Figure 4.24: Dispersion des particules à terme court. $Re_{\lambda} = 94$, $T_L = 0.129(s)$.



Figure 4.25: rms(X) des particules. $Re_{\lambda}=94$. La figure de droite correspond aux temps courts.



Figure 4.26: rms(X) des particules. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de droite correspond aux temps courts.

4.6 Conclusion

Les effets de l'introduction d'une vitesse Lagrangienne, fluctuante de sous-maille, reconstituée à l'aide d'une équation de Langevin sont étudiés à travers des comparaisons avec les résultats de DNS. L'influence du modèle de sous-maille utilisé pour la résolution du champ Eulérien est aussi examinée.

Nous avons examiné en détail les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne, la fonction de structure temporelle Lagrangienne, le déplacement moyen et la dispersion des particules. Le résultat le plus marquant est que cette modélisation stochastique permet de mieux reconstituer les corrélations en temps du champ de vitesse Lagrangienne.

- En temps court, l'influence de modèle stochastique Lagrangien de sous-maille est significative, et l'amélioration sur la corrélation de vitesse et sur la fonction de structure temporelle Lagrangienne est sensible.

- En ajoutant le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne T_L obtenue par le modèle classique, est plus proche de celle obtenue en DNS. Cette amélioration est importante.

- La dispersion des particules est progressivement améliorée en LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille en temps long. Cette amélioration se manifeste plus clairement quand le nombre de Reynolds augmente.

Chapitre 5

Diffusion Lagrangienne d'un scalaire passif

5.1 Introduction

Le travail effectué jusqu'ici a montré que, dans le cadre de la turbulence incompressible, à l'aide d'une modélisation stochastique de la fluctuation Lagrangienne de sous-maille, on peut améliorer la prédiction de la corrélation temporelle Lagrangienne par la simulation des grandes échelles.

Dans la suite, nous concentrons notre attention sur le mélange turbulent et sur l'application de ce modèle à la dispersion d'un scalaire passif. Pour un scalaire passif, par exemple la concentration, la diffusion du scalaire est contrôlée par le champ turbulent, mais il n'y a pas d'action du scalaire passif sur le champ de vitesse turbulent. Les domaines possibles d'application industrielle sont l'environnement pour la dispersion de polluants ou l'industrie chimique où le processus de mélange turbulent doit être parfaitement contrôlé.

La modélisation de l'action des petites échelles non-simulées en LES sur le champ Lagrangien de vitesse constitue en effet l'un des buts de cette étude. Habituellement, en simulation des grandes échelles, dans l'approche Eulérienne de la diffusion, on utilise une diffusivité turbulente pour tenir compte de l'effet de sous-maille du champ de vitesse. Or cette modélisation rencontre beaucoup de difficultés quand on examine l'effet des petites échelles dans le processus de mélange. Le problème est important pour la combustion et plus généralement pour les réactions chimiques. Afin de tenir compte plus finement de l'action de la sous-maille dans notre approche Lagrangienne de la diffusion, nous introduisons une fluctuation du champ de vitesse Lagrangienne de sous-maille dont l'équation est celle d'un processus stochastique de Langevin, tandis que les effets de sous-maille du champ Eulérien de vitesse sont représentées par une viscosité turbulente.

Un des avantages de l'utilisation du modèle stochastique de suivi Lagrangien des

particules est d'avoir la possibilité d'envisager de tenir compte de l'effet de la diffusion moléculaire et des réactions chimiques de façon plus naturelle en prenant en compte le contact et donc les échanges entre particules porteuse d'espèces. A travers un modèle d'échange, il est alors possible de tenir compte de l'effet du nombre de Schmidt.

Dans ce chapitre, nous étudions la dispersion Lagrangienne d'un scalaire passif dans un écoulement turbulent homogène et dans une turbulence inhomogène, et nous détaillons le modèle de diffusion couplé avec l'approche stochastique Lagrangienne. Nous allons comparer nos résultats de simulation numérique avec ceux issus de l'expérience (Huq et Britter [4] et Zhang [2]). Un modèle de diffusion Lagrangienne est employé. La prise en compte de l'effet du nombre de Schmidt est également étudiée.

5.2 Etude théorique

5.2.1 Equation de diffusion d'un scalaire

L'équation d'évolution d'un scalaire passif dans le cadre Eulérien s'écrit:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j \frac{\partial c}{\partial x_j} = \kappa \frac{\partial^2 c}{\partial x_j \partial x_j} \tag{5.1}$$

où κ est le coefficient de diffusivité d'un scalaire. Le nombre de Schmidt, traduisant l'effet relatif de la viscosité cinématique (ν) et de la diffusivité moléculaires (κ), est défini par:

$$Sc = \frac{\nu}{\kappa} \tag{5.2}$$

La décomposition de Reynolds est adoptée dans ce qui suit:

$$c(x,t) = \langle c(x,t) \rangle + c'(x,t)$$
(5.3)

où $\langle c(x,t) \rangle$ est la moyenne de scalaire passif, et c'(x,t) la fluctuation.

5.2.2 Modèle de diffusion Lagrangien

Le modèle de suivi Lagrangien à une particule et une échelle de temps est décrit dans le chapitre 3. Il permet de suivre les trajectoires des particules fluides mais il est incapable de représenter les phénomènes de diffusion des molécules et de réaction chimique.

Pour résoudre ce problème, nous avons choisi de coupler le suivi des particules à un

modèle de diffusion de constituants réactifs. Ce type d'approche a été utilisé initialement pour des problème de combustion ou de génie des procédés.

Curl [69] a proposé une approche envisageant l'interaction directe entre particules suivies pour modéliser l'interaction des gouttelettes de deux espèces chimiques à l'état liquide. Michelot [50] a utilisé cette approche dans le cas de mélange turbulent de scalaire (la concentration). Il a pris un modèle stochastique à une particule et une échelle de temps pour simuler les grandeurs turbulentes moyennes de l'écoulement, et il a validé cette approche en comparaison avec des résultats expérimentaux d'une couche de mélange se développant dans une turbulence de grille.

On considère un ensemble de N_p particules dans une turbulence. A chaque instant, les particules sont sélectionnées aléatoirement par paires (m, n), et leurs concentrations sont notées $c_m(t)$ et $c_n(t)$.



Figure 5.1: Mélange aléatoire.

Le domaine d'étude est toujours découpé en boîtes et les particules sélectionnées aléatoirement par paire (figure 5.1). Chaque paire (m, n) participe maintenant à la diffusion suivant le système d'équations d'évolution:

$$\begin{cases} \frac{d c_m(t)}{dt} = \frac{\psi}{T_{dif}} \left(c_n(t) - c_m(t) \right) \\ \frac{d c_n(t)}{dt} = \frac{\psi}{T_{dif}} \left(c_m(t) - c_n(t) \right) \end{cases}$$
(5.4)

où ψ est une variable aléatoire équiprobable sur [0, 1]. (Hsu & Chen (1991) [70]). T_{dif} est l'échelle caractéristique du temps de décroissance des fluctuations de scalaire.

Le coefficient ψ

Michelot [50] a indiqué, dans sa thèse, que si l'on prend un nombre aléatoire ψ , suivant la loi normale proposée par Hus et Chen [70], les résultats d'évolution de la concentration des particules ne sont pas corrects. Il a affirmé que ceci vient du caractère doublement aléatoire de son modèle: l'un est le tirage aléatoire de la paire de particules qui échange l'espèce, l'autre est l'échange aléatoire de matière dans l'équation d'évolution de la concentration (Equation 5.10).

Avec une constante à la place de ψ , le modèle perd alors son défaut principal qui était de ne jamais diffuser une distribution de Dirac initiale sur la concentration mais simplement de la déplacer vers une distribution de Dirac de la valeur moyenne. Il a ainsi été démontré que seule une constante permettrait la diffusion des distributions de Dirac (0 et 1) vers le bon résultat. Il a proposé de prendre la valeur de $\psi = 0.5$. Il a alors démontré que ce modèle est équivalent au modèle L.M.S.E. (Linear Mean Square Estimation) de Dopazo [71].

Dans cette étude, nous imposons donc une valeur uniforme au coefficient ψ . Le choix de la valeur de ψ sera discutée quand nous discuterons l'expérience de Huq et Britter [4] en LES.

5.3 Etude de l'échelle intégrale temporelle de la diffusion d'un scalaire

Il est difficile de bien évaluer une échelle intégrale temporelle T_{dif} pour la diffusion d'un scalaire passif. Dans différentes turbulences, par exemple la turbulence homogène isotrope et la turbulence de couche limite, le temps de diffusion du scalaire a des valeurs différentes. La distribution du scalaire dans la même turbulence varie, suivant si on a à faire avec une source de scalaire en un point, en une ligne, ou en un plan. Le temps de diffusion du scalaire possède alors des valeurs différentes.

• Pope [49] propose de calculer l'échelle de temps caractéristique T_{dif} qui est associée à la probabilité $\frac{\Delta t}{T_{dif}}$ du mélange parfait, soit:

$$c_m(t + \Delta t) = c_n(t + \Delta t) = \frac{c_m(t) + c_n(t)}{2}$$
 (5.5)

ou de non mélange $\left(1 - \frac{\Delta t}{T_{dif}}\right)$, soit:

$$\begin{cases} c_m(t + \Delta t) = c_m(t) \\ c_n(t + \Delta t) = c_n(t) \end{cases}$$
(5.6)

Par analogie avec l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de vitesse

$$T_u = \frac{k}{\epsilon} \tag{5.7}$$

où k est l'énergie cinétique de la turbulence, et ϵ la dissipation de l'énergie, on peut également définir une échelle intégrale temporelle T_{dif} pour les fluctuations de scalaire:

$$T_{dif} = \frac{\langle \phi^2 \rangle}{\langle \chi \rangle} \tag{5.8}$$

où $\langle \phi^2 \rangle$ est défini comme la variance de la fluctuation de scalaire, et $\langle \chi \rangle$, le taux de dissipation moyenne du scalaire.

• Spalding (1971) [72] considère que le temps caractéristique de décroissance des fluctuation de scalaire T_{dif} est proportionnel à l'échelle de temps de décroissance des fluctuations de vitesse T_u :

$$T_{dif} = \frac{T_u}{C_{dif}} \tag{5.9}$$

et le modèle de diffusion s'écrit alors:

$$\begin{cases} \frac{d c_m(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2 T_u} \left(c_n(t) - c_m(t) \right) \\ \frac{d c_n(t)}{dt} = \frac{C_{dif}}{2 T_u} \left(c_m(t) - c_n(t) \right) \end{cases}$$
(5.10)

Ce modèle conduit à une densité de probabilité de concentration qui ne relaxe pas vers une courbe gaussienne mais a l'avantage d'être continue en temps (Michelot [50]). Pope (1985) [49] propose d'utiliser un coefficient de proportionnalité C_{dif} égal à 2. Michelot [50] trouve que $C_{dif} = 2.25$ en liant le temps caractéristique de la diffusion et la variance de la concentration $\overline{\theta^2}$ dans une turbulence homogène isotrope. Mais il n'a pas considéré l'influence du nombre de Reynolds et du nombre de Schmidt. Nous allons déterminer ce paramètre en nous basant sur les travaux de recherches antérieurs et par une étude qualitative lorsque nous menons des simulations des grandes échelles pour reproduire l'expérience de Huq et Britter [4].

5.3.1 Travaux de recherches antérieurs

Relation entre les échelles intégrales temporelles Eulériennes

En effet, l'échelle de temps de décroissance des fluctuation de vitesse T_u et de scalaire T_{dif} utilisées dans le modèle de diffusion de scalaire (équation 5.9, 5.10) par Michelot [50] sont deux échelles Eulériennes, notée T_u^E et T_{ϕ}^E . On a une relation entre ces deux temps caractéristiques Eulériens, qui écrit:

$$R^{E} = \frac{T_{\phi}^{E}}{T_{u}^{E}} = \frac{\langle \phi^{2} \rangle}{\langle \chi \rangle} \frac{\langle \epsilon \rangle}{k}$$
(5.11)

Ce rapport est souvent discuté dans la littérature en mélange turbulent de scalaire, comme par exemple par Eswaran [6], Fox [73], [74]. Nous rappelons ici les résultats obtenus par des simulations numériques directes dans trois travaux de recherche récents:

1. Résultats de Donzis [3].

Les résultats de Donzis [3] pour cette relation Eulérienne sont donnés dans le tableau (5.1). Il apparaît que le rapport entre les deux temps Eulériens est une fonction des nombres de Reynolds et de Schmidt. Avec l'augmentation de Re_{λ} , ce rapport Eulérien diminue; au contraire, avec la croissance de S_c , ce rapport Eulérien augmente.

Re_{λ}	Sc	R^E
8	8	1.26
8	512	3.38
8	1024	6.57
28	0.7	0.56
36	7	0.97
38	8	0.93

Tableau 5.1: Résultats de Donzis [3] par DNS.

L'auteur trace sur la figure (5.2) $(R^E)^{-1}$ en fonction de Re_{λ} pour $S_c = 1$. Il montre que le rapport R^E varie de 0.3 à 10. Pour un grand nombre de Reynolds Re_{λ} , ce rapport a une valeur constante d'environ 0.6.

2. Résultats de Watanabe [75].

Ils apparaissent, sur la figure (5.3), où ce rapport est de $2.0 \sim 4.0$ pour un nombre de Schmidt petit et un nombre de Reynolds grand ($Re_{\lambda} \geq 100$ et $Sc = 0.7 \sim 1.0$) obtenu en DNS.

3. Formulation de Borgas [76] (2004).



Figure 5.2: Résultat de DNS. $S_c = 1$.



Figure 5.3: Résultat de DNS.

Borgas [76] a proposé récemment une formulation du rapport Eulérien \mathbb{R}^E sous la forme:

$$R^{E} = 0.61 + f(Re_{\lambda}, S_{c}) \tag{5.12}$$

où f est une fonction du nombre de Reynolds Re_{λ} et du nombre de Schmidt Sc:

$$f(Re_{\lambda}, S_c) = \frac{10}{Re_{\lambda}} + \frac{1}{2}\sqrt{15}B_0 \frac{Ln(S_c)}{Re_{\lambda}}$$
(5.13)

 B_0 est une constante ayant une valeur égale à 5.0.

Relation entre les échelles intégrales temporelles Lagrangiennes

Yeung [31] a fait des simulations numériques directes pour le champ de vitesse et de scalaire dans une turbulence homogène isotrope et statistiquement stationnaire. Ensuite, il a fait un suivi Lagrangien des particules. Il a calculé les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, pour le champ de vitesse et de scalaire. Selon les résultats, il nous a présenté une conclusion: "la fluctuation de scalaire Lagrangienne n'est pas un processus Markovien, et son échelle intégrale temporelle est supérieur à celle de la vitesse Lagrangienne des particules dans une turbulence homogène isotrope stationnaire". Nous pouvons écrire:

$$T_{\phi}^L > T_u^L$$

Dans les tableaux (5.2, 5.3, 5.4, et 5.5), le rapport Lagrangien $R^L = \frac{T_{\phi}^L}{T_u^L}$ obtenu dans la DNS de Yeung [31] est donné. Les nombres de Reynolds et de Schmidt sont différents.

	Sc = 0.25	Sc = 0.5	Sc = 1.0
R^E	2.826	2.254	1.843
R^L	1.89	2.03	2.17

Tableau 5.2: Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 40$

	Sc = 0.125	Sc = 0.25	Sc = 1.0
R^E	3.740	3.253	2.548
R^L	1.97	2.04	2.19

Tableau 5.3: Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 90$

	Sc = 0.125	Sc = 1.0
R^E	3.188	2.447
R^L	1.73	1.88

Tableau 5.4: Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 130$

	Sc = 0.125	Sc = 1.0
R^E	2.746	2.376
R^L	2.22	2.33

Tableau 5.5: Relation entre les échelles intégrales. $Re_{\lambda} = 230$

Le rapport, dans la simulation directe (DNS) de Yeung pour un nombre de Schmidt petit, est à peu près égal à 2.0. Plus le nombre de Reynolds R_{λ} est grand, plus T_{ϕ}^{L} est grand.

Pour la diffusion Lagrangienne de scalaire passif, il est plus raisonnable d'utiliser l'échelle de temps Lagrangienne que l'échelle Eulérienne, notés respectivement T_u^L et T_u^E . Dans la suite, nous n'exprimons plus le modèle avec l'échelle temporelle de la turbulence en décroissance T_u^E , mais avec l'échelle de temps intégrale Lagrangienne T_u^L .

Nous constatons que, le coefficient, C_{dif} (R^E ou R^L), n'a pas une valeur unique. En fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Schmidt, ce coefficient peut varier de 0.1 à 10. Nous verrons dans le prochain paragraphe, à travers d'une étude qualitative, comment déterminer ce coefficient. Dans la suite, ce coefficient sera tout simplement nommé R.

5.4 Diffusion d'un scalaire passif dans une turbulence homogène

Dans cette section, on applique le modèle de diffusion de scalaire en LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, qui est présenté dans le chapitre 3, dans le cas d'une turbulence homogène isotrope en décroissance. Nous allons tout d'abord introduire l'expérience de Huq & Britter [4]. Après une étude qualitative pour calibrer le coefficient du modèle de mélange, nous réalisons des simulations numériques en nous plaçant dans la même condition que l'expérience de Huq et Britter. Nous présentons les résultats en comparant avec ceux de l'expérience. Nous allons montrer l'amélioration des résultats obtenue lorsque le modèle stochastique de sous-maille est utilisé.

5.4.1 Expérience de Huq et Britter (1994)

Huq et Britter (1994) [4] ont fait l'expérience du mélange d'un scalaire passif (une concentration) dans un écoulement turbulent homogène isotrope. La turbulence générée par une grille est décroissante.

Deux valeurs du nombre de Schmidt Sc de 7 et 700 sont obtenues dans leur expérience. La taille de la maille de grille M, la vitesse moyenne U de l'écoulement dans la direction x et le nombre de Reynolds construit sur l'échelle de Taylor λ sont:

$$\begin{cases} M = 0.64 \, cm \\ U = 7.7 \, cm \\ Re_{\lambda} = 15 \end{cases}$$



Figure 5.4: Concentration moyenne dans l'expérience de Huq et Britter. $T = 15T_{\Lambda}$.

Sur la figure (5.4), on présente la concentration moyenne pour un temps long dans l'expérience de Huq et Britter, avec des nombres de Schmidt S_c différents. On peut constater que l'effet du nombre de Schmidt est très faible.

Un des paramètres importants est l'épaisseur de la dispersion de scalaire H, qui est défini dans le travail de Huq et Britter par:

$$H = \frac{\Delta C}{\left(\frac{dc}{dz}\right)_{z=0}} \tag{5.14}$$

Nous donnons les épaisseurs correspondant à des positions d'observation différentes de l'expérience de Huq et Britter dans le tableau (5.6). Nous allons calculer l'épaisseur de dispersion du scalaire et normaliser nos résultats dans la direction z par ce paramètre.

Position réelle	Temps réel	Temps normalisé	Epaisseur
$x_1 = 24(cm)$	$T_1 = 3.1(s)$	$4T_{\Lambda}$	$H_1 = 2.0(cm)$
$x_2 = 40(cm)$	$T_2 = 5.2(s)$	$7T_{\Lambda}$	$H_2 = 2.4(cm)$
$x_3 = 94(cm)$	$T_3 = 12.2(s)$	$15T_{\Lambda}$	$H_3 = 4.2(cm)$

Tableau 5.6: Epaisseur de la dispersion du scalaire dans l'expérience de Huq et Britter.

5.4.2 Etude qualitative

On se place dans une turbulence homogène dont la moitié est marquée par un scalaire de concentration moyenne uniforme. Le nombre de Reynolds Re_{λ} est égal à 10.

Selon la revue des travaux de recherches du paragraphe précédent, on sait qu'il y a une influence du nombre de Reynolds (Re_{λ}) et du nombre de Schmidt (S_c) sur la relation entre les deux temps de décorrélation. Dans cette partie, on va faire une étude qualitative sur ce coefficient par la LES couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sousmaille. On va analyser la moyenne du scalaire, la variance des fluctuations du scalaire et la corrélation des fluctuations du scalaire quand le coefficient R varie.

Conditions de simulation

Tenant compte du faible nombre de Reynolds dans l'expérience, et afin de maximiser l'effet de sous-maille, les simulations des grandes échelles que nous avons menées sont réalisées sur un maillage en 32^3 .

Condition initiale

On met des particules dans tout le domaine de simulation. Les particules, qui se trouvent dans la moitié supérieure du domaine (la direction z), ont une concentration moyenne dont la valeur est 1 à l'instant initial. Les autres particules, dans la moitié inférieure du domaine, ont une concentration égale à 0 à l'instant initial. Les valeurs 0 et 1 ont été choisies arbitrairement pour faciliter la statistique. On va ensuite suivre l'évolution du mélange de toutes ces particules.

Conditions aux limites

Les conditions aux limites pour le champ de vitesse sont encore périodiques dans les trois dimensions. Pour éviter l'influence de la périodicité sur le mélange du scalaire, nous avons suffisamment prolongé la hauteur de la boîte. Cela assure que la dispersion du scalaire n'atteindra pas les frontières de la boîte dans la direction z. Dans la direction inhomogène, que ce soit dans le cas de turbulence inhomogène ou dans le cas où le scalaire se trouve initialement dans la moitié de la boite, la longueur de la boite numérique est rallongée de 4 fois.

Intervalle de temps

Nous avons déjà vérifié, dans le chapitre 2, pour le modèle de Cui-Shao aux temps courts $(t/T_L \leq 4)$, que si l'intervalle de temps dt est augmenté à 2dt, la résolution temporelle est suffisamment précise, et le temps de calcul est divisé par deux. L'intervalle de temps est imposé par:

$$\widetilde{dt} = \frac{0.0256}{N}(s)$$
(5.15)

où N est le nombre de mailles dans une direction. Par exemple, N = 32, dt = 0.0008(s). Nous veillons à ce que la condition de CFL soit toujours satisfaite.

Boîte de mélange

Pour appliquer le modèle de diffusion, il est nécessaire de prendre des boîtes de mélange à l'intérieur desquelles on peut supposer que les particules fluides sont suffisamment proches pour se mélanger. Il faut alors bien choisir la taille des boîtes de mélange et le nombre de particules dans chaque boîte.

Cette hypothèse conditionne le fait que la taille de ces boîtes Δ_m doit être inférieure à l'échelle de longueur caractéristique de l'écoulement (Pope [49]). Michelot [50] propose de prendre comme échelle de longueur caractéristique la grandeur $\sigma_u T_L$.

$$\Delta_m < \sigma_u T_L$$

où σ_u est l'écart type de la fluctuation de vitesse, et T_L l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne.

C'est ce critère que nous adoptons dans la suite.

Nombre de particules moyennes dans chaque boîte

Une simulation numérique est limitée par la mémoire et la vitesse de l'ordinateur. Le nombre de particules pour le cas du domaine considéré ici est beaucoup plus grand que pour la source ponctuelle ou la source linéique.

D'une part, on doit s'attendre à lisser les profils en augmentant le nombre de particules suivies, la précision statistique du modèle étant bien évidemment directement liée au nombre de particules N_p .

Il est important de noter qu'augmenter le nombre de particules lisse les courbes en affinant la statistique, alors qu'augmenter la taille des segments les lisse par perte d'information spatiale. La moyenne sera une grandeur d'autant moins locale que le segment sur lequel on la calcule sera conséquent. Il faudra veiller à conserver un compromis entre précision et temps de calcul.

Modèle de sous-maille et modèle stochastique Lagrangien

Dans la résolution du champ Eulérien par LES, nous utilisons le modèle de Cui-Shao [11] (équation 1.40) pour le champ de vitesse de la turbulence.

Pour étudier le mouvement des particules et le mélange turbulent, nous avons fait le suivi Lagrangien des particules fluides avec et sans le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille (équation 3.56).

Dans le cas ou le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille est utilisé, le temps de corrélation caractéristique $T_L^>$ de sous-maille, est calculé avec l'équation de transport de l'énergie de sous-maille. La constante C_0 est fixée à 4.5.

Schéma numérique en temps pour la résolution du modèle de mélange

On peut écrire l'équation de diffusion du scalaire (équation 5.4) sous la forme discrète (schéma du 2ème ordre de Runge-Kutta). Ce schéma se décompose en deux étapes. La première étape est sous la forme:

$$\begin{cases} \overline{c_m^{i+1}} = c_m^i + \frac{\Delta t}{2 T_{dif}} (c_n^i - c_m^i) \\ \overline{c_n^{i+1}} = c_n^i + \frac{\Delta t}{2 T_{dif}} (c_m^i - c_n^i) \end{cases}$$
(5.16)

La seconde étape s'écrit :

$$\begin{cases}
c_m^{i+1} = c_m^i + \frac{\Delta t}{2T_{dif}} \frac{(c_n^i - c_m^i) + (\overline{c_n^{i+1}} - \overline{c_m^{i+1}})}{2} \\
c_n^{i+1} = c_n^i + \frac{\Delta t}{2T_{dif}} \frac{(c_m^i - c_n^i) + (\overline{c_m^{i+1}} - \overline{c_n^{i+1}})}{2}
\end{cases}$$
(5.17)

Les quantités - désignent les valeurs intermédiaire entre deux pas de temps successifs.

5.4.3 Résultats de l'étude qualitative

Profil de concentration moyenne

Le profil de la concentration moyenne pour les différentes positions en z $\langle c(z) \rangle$ est évalué par l'expression :

$$\langle c(z) \rangle = \frac{1}{N_p(z)} \sum_{n=1}^{N_p(z)} c_n$$
 (5.18)

où $N_p(z)$ est le nombre des particules qui se trouvent dans ce plan.

Le résultat à l'instant $t = 15T_{\lambda}$, est tracé sur la figure (5.5). Les différences entre les courbes obtenues avec différents R sont presque imperceptibles.



Figure 5.5: Profil de la concentration moyenne. $t = 15T_{\Lambda}$.

Ecart-type des fluctuations du scalaire

L'écart-type des fluctuations du scalaire est défini par:

$$rms(c')(z) = \sqrt{\langle [c_n - \langle c(z) \rangle]^2 \rangle}$$
(5.19)

Les résultats sont donnés sur la figures (5.6). Elle montre une comparaison de l'écarttype des fluctuations du scalaire pour différentes valeurs de R. Nous avons trouvé quand R augmente, que le maximum de cet écart type augmente. Par contre, l'épaisseur de la couche de mélange diminue quand R s'accroît. Cela indique que, quand R est plus petit, le temps de diffusion de scalaire est aussi plus court, le mélange et la dispersion sont donc plus rapides.



Figure 5.6: Rms des fluctuations du scalaire. $t = 15T_{\Lambda}$.

Corrélation des fluctuations du scalaire

Comme pour la corrélation de vitesse Lagrangienne, on définit la corrélation Lagrangienne des fluctuations du scalaire par:

$$R_{c'c'}(\tau) = \frac{\langle c'_{t=t_0} c'_{t=t_0+\tau} \rangle}{rms(c'_{t=t_0}) rms(c'_{t=t_0+\tau})}$$
(5.20)

Nous avons comparé les corrélations et les échelles intégrales temporelles Lagrangiennes du scalaire passif pour différentes valeurs de \mathbb{R}^L . Les résultats sont tracés sur la
figure (5.7). Il ressort que, quand R est plus petit, la décroissance de la corrélation des fluctuations du scalaire est plus rapide, donc que la diffusion est plus forte.



Figure 5.7: Corrélation des fluctuations du scalaire.

Calibration du coefficient R

Dans la suite, les simulations que nous menons utilisent la relation Lagrangienne entre les deux temps de décorrélation R^L (ou R) dans le modèle de diffusion de scalaire (équation 5.4).

Dans le travail de Yeung [31], le coefficient R est autour d'une valeur de 2.0 dans les cas de nombres de Schmidt petits. Nous avons donc choisi la même valeur R = 2.0 pour le cas de Sc = 7 dans le modèle de diffusion de scalaire en LES.

Le coefficient R, pour le cas de Sc = 700, est déterminé en comparant les recherches antérieurs (par exemple Donzis [3]), les résultats de l'étude qualitative, aux résultats de Huq et Britter à la section correspondant à $t = 15T_{\lambda}$. La valeur de R = 4.0 a été choisie en LES.

Pour les points particuliers, où l'énergie cinétique est nulle k = 0, le temps Lagrangien T_L obtenue par modèle classique est aussi nul. Le modèle de mélange Lagrangien n'est plus valable dans ce cas-là. En effet, il n'y a que la dissipation autour de ces points, et on considère que le mélange turbulent est parfait:

$$c_m^{i+1} = c_n^{i+1} = \frac{c_m^i + c_n^i}{2} \tag{5.21}$$

5.4.4 Résultats quantitatifs et analyse

Dans ce paragraphe, nous présentons les résultats des simulations numériques par LES, couplée ou non avec le modèle stochastique de sous-maille. En comparant avec les données de l'expérience de Huq et Britter, nous allons montrer l'influence du modèle stochastique Lagrangien sur la dispersion du scalaire passif.

Champ de vitesse

Huq et Britter nous donnent une expression de l'évolution de l'énergie des fluctuations:

$$\left(\frac{u_i'}{U}\right)^2 = A \left(\frac{x}{M} - 4\right)^{-1.4} \tag{5.22}$$

où u'_i est la composante de la fluctuation de vitesse, x la position d'observation, et la constante A est égale respectivement à 0.07 pour u' et 0.05 pour w'.



Figure 5.8: Energie de fluctuation.

On présente l'évolution d'énergie cinétique turbulente obtenue en LES sur la figure (5.8). Le résultat de simulation numérique est en très bon accord avec l'expérience.

Evolution de l'épaisseur de diffusion H du scalaire en fonction du temps

On donne l'évolution de l'épaisseur de dispersion de scalaire, sur la figure (5.9), dans le cas où $S_c = 700$. Les résultats sont normalisés par la valeur à l'instant $t = 4T_{\lambda}$. Quand le temps s'écoule, l'épaisseur devient de plus en plus grande. Notre résultat est cohérent avec les mesures de Huq et Britter. Quand le modèle stochastique est utilisé, l'épaisseur de la dispersion augmente. A temps long, la modélisation stochastique amène une amélioration importante, en accord avec les remarques effectuées, sur la quantité rms(X(t)), étudiée au chapitre 4 (figure 4.25).



Figure 5.9: Epaisseur de dispersion de scalaire. Sc=700.

Influence du modèle stochastique

Sur les figures (5.10 et 5.11) sont tracés la concentration moyenne et l'écart-type des fluctuations de la concentration, avec ou sans modèle stochastique Lagrangien de sousmaille. Le rôle de la modélisation stochastique se manifeste aux bords de la couche de mélange.



Figure 5.10: Concentration moyenne. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$ pour la figure de gauche, $T = 15T_{\lambda}$ pour celle de droite.



Figure 5.11: Fluctuation de concentration. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$ pour la figure de gauche, $T = 15T_{\lambda}$ pour celle de droite.

Concentration moyenne

On présente la concentration moyenne sur les figures (5.12, 5.13, 5.14 et 5.15). La position spatiale en direction de z est normalisée par l'épaisseur de dispersion. Les trois premières figures donnent la concentration moyenne pour des temps différents et pour le cas du nombre de Schmidt de 700. La figure (5.15) donne la concentration moyenne aux temps longs, cas correspondant à $S_c = 7$.



Figure 5.12: Concentration moyenne. Sc=700. $T = 4T_{\Lambda}$.

Nous constatons que, pour les deux nombres de Schmidt, il y a des améliorations nettes de la prédiction numérique quand on ajoute le modèle stochastique Lagrangien de



Figure 5.13: Concentration moyenne. Sc= 700. $T=7T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.14: Concentration moyenne. Sc=700. $T=15T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.15: Concentration moyenne. Sc=7. $T = 15T_{\Lambda}$.

sous-maille à temps long. Et, à temps court, la différence entre les résultats avec ou sans modèle stochastique est petite. De toute évidence, au regard de ces résultats, surtout aux bords de la couche de mélange, l'apport du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille est indéniable.



Figure 5.16: Comparaison de la concentration moyenne pour différents nombres de Schmidt, à $T = 15T_{\Lambda}$.

Nous avons aussi fait une comparaison de la concentration moyenne, en temps long, pour des nombres de Schmidt S_c différents. Sur la figure (5.16) sont tracés les résultats

de la simulation numérique avec ceux de l'expérience de Huq et Britter. D'abord nous constatons que l'accord avec l'expérience est excellent. Ensuite, nous trouvons également que, comme dans l'expérience, l'influence du nombre de Schmidt sur la concentration moyenne normalisée est négligeable.



Figure 5.17: Evolution temporelle de la concentration moyenne. Sc = 700.

Nous avons tracé sur la figure (5.17), la concentration moyenne pour le cas du nombre de Schmidt égal à 700, à différents instants (T_1 correspond à $t = 4T_{\lambda}$, T_2 à $t = 7T_{\lambda}$ et T_3 à $t = 15T_{\lambda}$), Après avoir normalisé la position spatiale z par les épaisseurs de dispersion correspondantes, toutes les courbes de concentration moyenne se rassemblent et sont très proches des courbes de Huq et Britter.

Variance des fluctuations du scalaire

Les profils verticaux de la valeur rms des fluctuations de concentration, rapportés à leur valeur maximum, dans les cas de nombres de Schmidt différents sont présentés sur les figures (5.18, 5.19, 5.20, 5.21, 5.22 et 5.23).

On observe essentiellement que:

- Le modèle de mélange Lagrangien fonctionne bien, les profils verticaux de la fluctuation de concentration sont en excellent accord avec les résultats expérimentaux.

- Il existe une amélioration en ajoutant le modèle stochastique Lagrangien de sousmaille, surtout pour les temps longs.

- La différence entre les courbes correspondant à différents nombres de Schmidt (Sc = 700 et Sc = 7) est faible (la figure 5.22).



Figure 5.18: Variance des fluctuations du scalaire. $Sc=700\,.~T=4T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.19: Variance des fluctuations du scalaire. $Sc=700\,.~T=7T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.20: Variance des fluctuations du scalaire. Sc = 700. $T = 15T_{\Lambda}$.



Figure 5.21: Variance des fluctuations du scalaire. $Sc=7\,.~T=15T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.22: Variance des fluctuations du scalaire pour différents nombres de Schmidt. $T=15T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.23: Evolution de la variance des fluctuations du scalaire au cours du temps. Sc = 700.

- Les résultats numériques et expérimentaux sont proches de la gaussienne (la figure 5.23), ce qui est en accord avec la théorie qui prévoit un développement du type.

$$\frac{\sqrt{c'^2(z)}}{\sqrt{c'^2}_{Max}} = exp(-(\frac{z}{H})^2)$$
(5.23)

La vérification de cette relation par les résultats expérimentaux et numériques, montre que la fluctuation de scalaire se disperse suivant cette loi de similitude.

Skewness des fluctuations du scalaire

Dans la simulation numérique, on peut calculer directement le moment d'ordre 3 des fluctuations de concentration avec notre modèle Lagrangien de mélange. La définition du moment d'ordre 3 est la suivante:

$$skew(c')(z) = \frac{\langle [c_n - \langle c(z) \rangle]^3 \rangle}{rms(c'(z))^3}$$
(5.24)

La figure (5.24) montre pour ce moment d'ordre 3, les résultats de la simulation numérique et de l'expérience. Nous constatons que le résultat de simulation est cohérent avec celui de l'expérience.



Figure 5.24: Skewness. Sc = 700.

Coefficient Is des fluctuations du scalaire

Il a été observé que l'influence du nombre de Schmidt est presque imperceptible sur les profils de variance des fluctuations du scalaire. Afin de bien caractériser l'influence du nombre de Schmidt sur la dispersion des fluctuations, dans le travail de Huq et Britter, les auteurs ont a été défini une grandeur Is par:

$$I_s(z) = \frac{\langle (c')^2(z) \rangle}{\langle c(z) \rangle (\langle c \rangle_{max} - \langle c(z) \rangle)}$$
(5.25)

On présente cette grandeur sur la figure (5.25). Les résultats de simulation sont en bon accord avec les mesures. Nous pouvons ainsi affirmer que l'utilisation du jeux de coefficient, R = 2 pour le petit Schmidt et R = 4 pour le grand Schmidt, represente bien l'effet de ce nombre sur la dispersion Lagrangienne.



Figure 5.25: Coefficient Is du scalaire. Sc = 700. $T = 15T_{\Lambda}$.

Flux de masse

Le flux de masse vertical peut être écrit sous la forme:

$$flux(z) = \frac{\langle u'(z) c'(z) \rangle}{rms(u'(z)) rms(c'(z))}$$
(5.26)

Un avantage important de la modélisation stochastique du transport de sous-maille des particules fluides est la détermination des flux de masse turbulents. Comme pour la variance ou les moments d'ordre supérieur à 2 du champ de concentration, les flux de masse turbulents sont obtenus directement et sans modélisation supplémentaire, à la différence des approches Eulériennes.

Les profils de flux de masse verticaux sont présentés sur les figures (5.26, 5.27, 5.28, 5.29, 5.30 et 5.31). Les valeurs sont normalisées par les épaisseurs correspondantes. Les résultats de la simulation numérique en LES couplée avec le modèle stochastique de sous-maille sont en bon accord avec les mesures. Les améliorations sont remarquables par rapport à la LES sans modèle stochastique. Cela montre l'importance de l'apport de la modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille.



Figure 5.26: Flux de scalaire. Sc = 700. $T = 4T_{\Lambda}$.

5.5 Diffusion d'un scalaire passif dans une turbulence inhomogène non cisaillée

Nous avons vu que la LES avec le nouveau modèle de sous-maille stochastique Lagrangien, nous permet de mieux prendre en compte, d'une part l'effet de décorrélation temporelle dans le champ de vitesse inhomogène, d'autre part l'effet de mélange des fluctuations de sous-maille sur la diffusion et la dispersion du scalaire passif dans une turbulence homogène.

Dans ce paragraphe, afin d'examiner l'influence de l'inhomogénéité spatiale, nous allons tester cette modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille, dans le cas d'une turbulence inhomogène simple: la couche de mélange sans cisaillement.



Figure 5.27: Flux de scalaire. Sc = 700. $T = 7T_{\Lambda}$.



Figure 5.28: Flux de scalaire. Sc = 700. $T = 15T_{\Lambda}$.



Figure 5.29: Flux de scalaire. Sc=7. $T=15T_{\Lambda}$.



Figure 5.30: Flux de scalaire pour différents nombres de Schmidt à $T = 15T_{\Lambda}$.



Figure 5.31: Evolution du flux de scalaire en temps. Sc=700.

Warhaft [77,78] et Zhang [1,2] ont étudié la couche de mélange non cisaillée en essayant de se placer dans une situation proche des hypothèses du problème théorique, à savoir une seule direction d'inhomogénéité et l'absence de cisaillement moyen.

5.5.1 Caractéristiques de la turbulence inhomogène sans cisaillement en décroissance

La turbulence inhomogène sans cisaillement, a fait l'objet de la thèse de L. Shao (1992, [24]). Pour les détails de cet écoulement particulier, le lecteur peut se référer' à ce travail.

Les caractéristiques de cet écoulement inhomogène sont présentées, en terme de spectres unidimensionnels, de corrélations Eulériennes et Lagrangiennes, et font ressortir l'échelle intégrale temporelle Lagrangienne pour différentes positions dans la direction z d'inhomogénéité.

Condition initiale

Spectres unidimensionnels

Nous avons étudié les spectres unidimensionnels, qui sont calculés de la manière suivante:



Figure 5.32: Spectre de l'énergie au début de calcul. LES 64³.

Rapport de l'énergie cinétique $\frac{E_1}{E_2}$	5.74
Ratio d'échelle intégrale longitudinale $\frac{\Lambda_1}{\Lambda_2}$	1.25
Nombre de Reynolds initial des grandes échelles	65
Nombre de Reynolds initial des petites échelles	38

Tableau 5.7: Condition initiale de la simulation dans le cas de la turbulence inhomogène.

- 1. Calcul de la transformée de Fourier suivant x de $u_i(x, y, z)$, le résultat est noté $\widetilde{u}_i(k_x, y, z)$.
- 2. Calcul de $E_{ij}(k_x, z) = \langle \widetilde{u}_i(k_x, y, z) \widetilde{u}_j^*(k_x, y, z) \rangle_y$, où $\langle \rangle_y$ désigne la moyenne dans la direction y.

Dans notre cas, nous nous intéressons surtout aux quantités diagonales E_{ii} . L'étude du comportement de E_{ii} nous permet une meilleure compréhension de la dynamique du processus de transport.

Sur les figures (5.33, 5.34 et 5.35), les spectres longitudinaux $E_{11}(k_x, z)$ (spectres de la composante u dans la direction X) sont tracés. La figure (5.33) donne les spectres initiaux t = 0 (s), la figure (5.34), les spectres au cours de la simulation t = 0.5 (s), et la figure (5.35), les spectres obtenus en fin de simulation (t = 1.5 (s)) pour différentes positions correspondant à z = 8 cm: milieu des grandes échelles, zone quasi-homogène; z = 15.5 cm, couche de mélange du côté des grandes échelles; z = 16 cm, couche de mélange du côté des petites échelles; z = 24 cm, milieu des petites échelles, zone quasihomogène, pour le cas correspondant à Re_{λ} égal à 38.



Figure 5.33: Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z au début du calcul. t = 0 (s).



Figure 5.34: Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z au cours du calcul. t = 0.5 (s).



Figure 5.35: Spectre $E_{11}(k_x, z)$ pour différents z à la fin du calcul. t = 1.5 (s).

Sur les figures (5.34 et 5.35), l'augmentation du spectre pour z = 16 cm indique l'effet du transport: au début du calcul, le spectre correspond au spectre en zône quasihomogène côté petites échelles, soit encore au champ de faible intensité. Quand le temps s'écoule, ce spectre est clairement contaminé par les tourbillons venant de la partie des grandes échelles. Le même genre de comportement peut aussi être observé sur le spectre transversal (spectre de w), sur les figures (5.36), 5.37 et (5.38).



Figure 5.36: Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z au début du calcul. t = 0 (s).

Ces résultats sont qualitativement en accord avec les résultats de la thèse de L. Shao.



Figure 5.37: Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z au cours du calcul. t = 0.5 (s).



Figure 5.38: Spectre $E_{33}(k_x, z)$ pour différents z à la fin du calcul. t = 1.5 (s).

Corrélation de vitesse pour différentes coordonnées z

Les définitions de la corrélation de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, pour différentes coordonnées z, dans une turbulence inhomogène sont données par les formes ci-dessous:

$$R_{ij}^{E}(z,\tau) = \frac{\langle u_i(x,y,z,t_0) \, u_j(x,y,z,t_0+\tau) \rangle_p}{\sqrt{\langle u_i(z,t_0)^2 \rangle_p} \sqrt{\langle u_j(z,t_0+\tau)^2 \rangle_p}}$$
(5.27)

$$R_{ij}^{L}(z,\tau) = \frac{\langle v_i(x_0, y_0, z_0, t_0) \, v_j(x, y, z, t_0 + \tau) \rangle_p}{\sqrt{\langle v_i(z_0, t_0)^2 \rangle_p} \sqrt{\langle v_j(z, t_0 + \tau)^2 \rangle_p}}$$
(5.28)

où $\langle \rangle_p$ signifie la moyenne en plan (dans la direction X et Y), $v(x_0, y_0, z_0, t_0)$ la vitesse initiale de la particule, et $v(x, y, z, t_0 + \tau)$ la vitesse instantanée.

Nous avons tout d'abord fait deux LES pour chacun des deux champs de turbulence homogène correspondant respectivement au côté grandes échelles et au côté petites échelles de la couche de mélange sans cisaillement. Puis, nous combinons les deux champs homogènes, et nous réalisons une LES pour cette turbulence inhomogène.

Les corrélations de vitesse sont présentées sur les figures (5.39, 5.40, 5.41 et 5.42).

Nous constatons qu'aussi bien les corrélations Eulériennes que les corrélations Lagrangiennes, décroissent plus vite au milieu de la zone des grandes échelles qu'au milieu de celle des petites échelles. Les corrélations des deux centres de zones quasi-homogènes sont identiques, au bruit statistique près, à celles évaluées indépendamment dans chaque turbulence homogène.

Les figures (5.39 et 5.41) donnent les corrélations de vitesse Eulérienne et Lagrangienne, au milieu de la zone quasi-homogène. L'influence de l'inhomogénéité spatiale arrive aux temps longs. Les figures (5.40 et 5.42) donnent les corrélations de vitesse dans la couche de mélange. Elles montrent que l'interaction entre les échelles différentes accélère la décorrélation de vitesse dès que la turbulence inhomogène évolue librement.

Sur la figure (5.43), sont présentées les corrélations de vitesse Lagrangienne aux positions z = 16 (cm) et z = 17 (cm). Il ressort que la décroissance de la corrélation de vitesse Lagrangienne avec la modélisation stochastique Lagrangienne de sous-maille est plus rapide que sans le modèle stochastique.

Temps intégral caractéristique Lagrangien T_L dans la turbulence inhomogène

Dans la turbulence inhomogène, on calcule le temps caractéristique Lagrangien pour les positions différentes en z. Après avoir intégré la corrélation de vitesse, on présente le résultat sur la figure (5.44).



Figure 5.39: Corrélation de vites se Eulérienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda}=65$.



Figure 5.40: Corrélation de vites se Eulérienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda}=65$.



Figure 5.41: Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. Zone quasi-homogène. $Re_{\lambda} = 65$.



Figure 5.42: Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. Zone de couche de mélange. $Re_{\lambda} = 65$.



Figure 5.43: Corrélation de vitesse Lagrangienne dans une turbulence inhomogène. $Re_{\lambda} = 65$. La figure de gauche concerne la position z = 16 (cm), et celle de droite z = 17 (cm).



Figure 5.44: Echelles intégrales temporelles Lagrangiennes pour les positions différentes en z. Cas C_1 , LES 64^3 . La zone correspondant aux petites valeurs de z est la zone des grandes échelles, celle qui correspond aux grands z est la zone des petites échelles.

On trouve qu'il y a différentes échelles intégrales temporelles Lagrangiennes pour des positions différentes en z compte tenu de l'interaction entre les différentes échelles. Dans la zone des grandes échelles (z petit), le temps Lagrangien a une valeur petite. Avec l'augmentation de position z, le temps Lagrangien est de plus en plus grand. Dans la zone quasi-homogène des petites échelles, le temps Lagrangien a une valeur maximale.

On approxime le temps intégral par:

$$T_L \sim \frac{\Lambda}{\sqrt{E}} \tag{5.29}$$

selon les données dans le tableau (5.1), on a donc:

$$\frac{T_{L_{grande}}}{T_{L_{petite}}} \sim \frac{1}{2} < 1 \tag{5.30}$$

Comme dans la turbulence homogène stationnaire, le temps Lagrangien obtenu dans la turbulence inhomogène par une LES avec ce modèle stochastique est plus petit que celui issu de la LES sans modèle stochastique.

5.5.2 L'expérience de Zhang (2003)

La couche de mélange sans cisaillement est constitué de deux champs turbulents homogènes mis côte à côte et ayant des caractéristiques différentes. L'un des deux champs contient un scalaire passif dont la concentration moyenne est égale à 1 au début, l'autre contient un scalaire initial ayant une concentration valant 0. Ce cas a été étudié par l'expérience de Zhang dans un tunnel à eau au LMFA [1]. Le nombre de Schmidt est voisin de 10^6 . Notons qu'à l'heure actuelle, la simulation directe ne peut pas atteindre un nombre de Schmidt assez élevé.

Les grilles utilisées pour générer la couche de mélange non cisaillée possèdent des caractéristiques géométriques différentes, ce qui permet de générer des écoulements possédant des rapports d'énergie cinétique et d'échelle turbulente très différents. Cela va directement influencer les caractéristiques turbulentes de la couche de mélange. Le rapport de maille entre les deux parties de la grille de turbulence dans l'étude expérimentale de Zhang [1,2] est deux, la maille de petite grille $M_1 = 2.5(cm)$ et de grande grille $M_2 = 5.0(cm)$ (figure 5.45).

Dans l'expérience de Zhang, il y a trois différentes positions d'observation. Nous les avons données dans le tableau (5.8).

Les caractéristiques à l'instant t = T1 apparaissent dans le tableau ci-dessous (5.9):



Figure 5.45: Dispositif expérimental.

Position réelle	Temps réel	Temps normalisé
$x_1 = 150(cm)$	$T_1 = 0.48(s)$	$3T_{\Lambda}$
$x_2 = 195(cm)$	$T_2 = 0.65(s)$	$4T_{\Lambda}$
$x_3 = 275(cm)$	$T_3 = 0.89(s)$	$6T_{\Lambda}$

Tableau 5.8: Trois positions d'observation dans l'expérience de Zhang.

5.5.3 Simulation numérique en LES

Dans cette partie, on va expliquer les simulations numériques par LES couplée avec le modèle stochastique de sous-maille. Le modèle Lagrangien de diffusion de scalaire est utilisé pour simuler la dispersion de scalaire dans cette turbulence inhomogène.

Compte tenu du faible nombre de Reynolds de l'expérience, et afin de maximiser l'effet de sous-maille, le maillage pour la LES est de 32^3 .

Domaine de simulation

Sur la figure (5.46), on présente le domaine de simulation qui est une boîte rectangulaire. Les deux turbulences homogènes générées indépendantes sont mises côte à côte. L'inhomogénéité se trouve seulement dans la direction z.

Nombre de Schmidt Sc	10^{6}
Vitesse moyenne U dans la direction x	300(cm/s)

Tableau 5.9: Paramètres de l'expérience de Zhang. t = T1

Domaine de simulation



Figure 5.46: Domaine de simulation.

Condition initiale

Comme dans le cas de la turbulence homogène, on met des particules dans tout le domaine de simulation. Les moitiés des particules qui se trouvent dans le domaine des grandes échelles possède un scalaire (la concentration par exemple) dont la valeur est uniforme et égale à 1 initialement. Dans le zone de turbulence à petites échelles, le scalaire a une valeur uniforme et égale à 0 au début.

Coefficient de l'échelle temporelle de diffusion de scalaire

Comme dans le paragraphe précédant, la relation entre les deux échelles temporelles Lagrangienne dans le modèle de mélange, celle de vitesse Lagrangienne T_u^L et celle de scalaire T_{ϕ}^L , est utilisée pour l'évaluation du coefficient du modèle de mélange. Nous savons que le rapport $R = \frac{T_{\phi}^L}{T_u^L}$ diminue quand le nombre de Reynolds de la turbulence augmente; par contre, il s'accroît quand le nombre de Schmidt augmente. Un rapport de R = 4, utilisé dans la simulation numérique de l'expérience de Huq et Britter pour $Re_{\lambda} = 15$ et Sc = 700, donne des résultats très satisfaisants. Dans l'expérience de Zhang, le nombre de Reynolds est $Re_{\lambda} = 25$, valeur du même ordre de grandeur que celui de l'expérience de Huq et Britter. En revanche, le nombre de Schmidt est très élevé, $Sc = 10^6$. Nous employons la valeur de R = 4 pour le modèle de mélange Lagrangien. L'utilisation de cette valeur de 4, déterminé dans le cas d'un nombre de Schmidt valant 700, alors que le cas actuel correspond à un nombre de Schmidt de 10^6 , est donc un test sévère pour le modèle.

Champ de vitesse

Afin de comparer les résultats de simulation numérique avec les mesures de Zhang, on garde les mêmes rapports d'énergie cinétique et d'échelle intégrale de la turbulence entre les grandes échelles et les petites échelles (tableau 5.10). Nous avons aussi généré cette turbulence inhomogène pour que les deux nombres de Reynolds, côté grandes échelles et côté petites échelles, soient les même que dans l'expérience de Zhang.

	Expérience	Simulation
Rapport de l'énergie $\frac{k_2}{k_1}$	2.48	2.46
Rapport de longueur intégrale $\frac{\Lambda_2}{\Lambda_1}$	1.27	1.24
Nombre de Reynolds des petites échelles $Re_{\lambda 1}$	21	21.8
Nombre de Reynolds des grandes échelles $Re_{\lambda 2}$	26	28.2

Tableau 5.10: Comparaison des paramètres importants entre l'expérience et simulation numérique.

5.5.4 Résultats et confrontation à l'expérience de Zhang X.H. [1,2]

Dans cette partie, nous présentons les résultats de simulation numérique, pour une LES couplée ou non avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille.

On présente la rms de la vitesse verticale au début du mélange turbulent pour les différentes positions en z sur la figure (5.47). Cette rms dans la zone des grandes échelles est environ 1.5 fois supérieure à celle de la zone des petites échelles.

Nous donnons les échelles intégrales temporelles Lagrangienne, obtenues par le modèle au début de la simulation, pour des positions différentes en z sur la figure (5.48). Cela montre que le temps Lagrangien dans la zone des petits échelles est plus grand que dans la zone des grandes échelles. Comme le rapport entre les deux énergies cinétiques n'est que de 2 dans notre simulation, la différence entre les deux temps Lagrangiens n'est pas vraiment significative.

Les spectres d'énergie pour différentes positions en z sont tracés sur la figure (5.49). Ils correspondent à t = 0 sur la figure de gauche; et à $t = 4T_{\Lambda}$ pour celle de droite. z = 96 (cm) correspond à la zone quasi-homogène des grandes échelles; et z = 32 à la zone quasi-homogène des petites échelles; z = 61 et z = 62 correspondent à la couche de mélange. Grâce à l'interaction entre les deux échelles, l'énergie dans la couche de mélange est plus petite que dans la zone des grandes échelles, et plus grandes que dans la zone des petites échelles.



Figure 5.47: Vitesse pour les positions différentes en z.



Figure 5.48: Echelle intégrale temporelle Lagrangienne pour différentes positions en z.

Du début jusqu'à $t = 4T_{\lambda}$, les spectres correspondant au milieux des zones quasi homogènes, sont clairement distincts. En revanche, dans le zone de mélange située autour de z = 61cm, 62cm, les spectres sont confondus à $t = 4T_{\lambda}$.



Figure 5.49: Spectre d'énergie pour différentes valeurs de z. La figure de gauche correspond à t = 0; celle de droite à $t = 4T_{\Lambda}$.

Nous présentons la concentration moyenne sur la figure (5.50), l'écart-type de la fluctuation de concentration sur les figures (5.51, 5.52, 5.53 et 5.54), et le flux de masse sur les figures (5.55, 5.56, 5.57 et 5.58). Toutes les courbes sont normalisées par l'épaisseur de la dispersion du scalaire dans la direction verticale.



Figure 5.50: Concentration moyenne à $t = 3T_{\Lambda}$. z_0 est la position centrale du mélange, où $\frac{d^2u(z)}{dz^2} = 0$, H est l'épaisseur de la zône de mélange.



Figure 5.51: Variance de la fluctuation de concentration à $t = 3T_{\Lambda}$.



Figure 5.52: Variance de la fluctuation de la concentration à $\,t=4T_{\Lambda}\,.$



Figure 5.53: Variance de la fluctuation de la concentration à $t = 6T_{\Lambda}$.



Figure 5.54: Evolution de variance de la fluctuation de concentration.



Figure 5.55: Flux de masse à $t = 3T_{\Lambda}$.



Figure 5.56: Flux de masse à $t = 4T_{\Lambda}$.



Figure 5.57: Flux de masse à $t = 6T_{\Lambda}$.



Figure 5.58: Evolution du flux de masse.

En comparant les résultats de simulation numérique, obtenus avec une LES couplée ou non avec le modèle stochastique de sous-maille, avec les mesures de Zhang, nous constatons les points suivants:

- Les résultats de simulation numérique sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Sur les profils de la concentration moyenne et de la valeur rms de la fluctuation du scalaire, les accords sont bons. Certes, sur le flux de masse, < c'w' >, l'accord numérique / expérience est moins bon mais reste satisfaisant.

- L'inhomogénéité est bien prise en compte par le modèle de mélange Lagrangien.

- L'adjonction du modèle stochastique Lagrangien de sous-maille apporte des améliorations sensibles.

- L'utilisation de la valeur de 4, dans le modèle de mélange Lagrangien, est capable de prendre en compte le mélange turbulent pour un nombre de Schmidt s'élevant jusqu'à $10^6\,.$

- Dans la zone des petites échelles, il y a de légers écarts entre les résultats de simulation et ceux de l'expérience. Ces écarts sont relativement petits (< 10% comparé à la valeur maximale au centre du zone de mélange). Soit cet écart est de l'ordre du bruit statistique lié à la précision des mesures; soit il reste encore à apporter des améliorations au modèle de mélange Lagrangien pour les petites échelles.

5.6 Conclusion

La LES est appliquée à l'étude de la dispersion de scalaires passifs dans un écoulement turbulent homogène et un autre inhomogène afin de valider le couplage entre la LES et le modèle stochastique. Les particules fluides contenant le scalaire sont suivies à chaque instant, donc la description est Lagrangienne. Une équation stochastique de Langevin est utilisée pour simuler la composante petite échelle de la vitesse des particules en sous-maille. Les résultats de la dynamique et de la dispersion d'un scalaire passif sont confrontés à l'expérience de Huq et Britter [4] dans une turbulence homogène et à l'expérience de Zhang [2] dans une turbulence inhomogène.

En résumé:

- Nous avons développé des outils en simulations numériques des grandes échelles pour des cas de nombres de Schmidt élevés de grands nombres de Reynolds, qui ne sont pas accessible à la DNS.

- Le modèle de mélange Lagrangien nous permet de simuler correctement la diffusion et la dispersion d'un scalaire passif, dans une turbulence homogène (Huq et Britter [4]) et dans une turbulence inhomogène (Zhang XH, [1,2]). - On utilise la relation entre les deux temps Lagrangiens de décorrélation \mathbb{R}^L dans le modèle de mélange.

- Le couplage entre la LES et le modèle stochastique de sous-maille est bien adapté à la modélisation du mouvement des particules fluides dans une maille. Il permet d'obtenir directement les statistiques du champ de scalaire: comme la concentration moyenne, la variance et le flux de masse.

- L'effet de Schmidt est bien pris en compte par le jeux de valeurs (2 et 4) utilisées pour le coefficient R dans le modèle de dispersion Lagrangienne (Curl, [69]).
Conclusion

Dans les problèmes de mélange turbulent ou de réaction chimique, lorsque les nombres de Reynolds Re et de Schmidt S_c sont grands, il est impossible d'utiliser une méthode de simulation numérique directe (DNS). Une alternative possible est d'utiliser une technique de simulation des grandes échelles (LES). Le principe de la LES consiste à séparer, à l'aide d'un filtre, le champ de vitesse en deux parties: les grandes structures et les petites. Les équations des grandes échelles sont ensuite résolues. Les actions des structures de sousmaille sont généralement modélisées à travers une viscosité turbulente. Cette technique nous offre la possibilité de connaître ainsi en détail les grandes structures turbulentes de la vitesse pour les écoulements à grands nombres de Reynolds. Toutefois des inconvénients apparaissent dans ces méthodes.

D'une part, dans certains cas de mélange turbulent de différentes espèces ainsi que dans les réactions chimiques, le nombre de Schmidt S_c peut être très grand, le rôle des petites structures devient plus important que celui des grandes structures. Dans cette situation, la LES classique n'est pas en mesure de bien prendre en compte le phénomène physique. Il est nécessaire d'introduire d'autres modélisations dans le cas de combustion, par exemple une modélisation de la densité de probabilité de sous-maille dans l'approche Eulérienne.

D'autre part, dans l'approche Lagrangienne de la diffusion ou de la dispersion d'un scalaire, on sait que les temps de décorrélation de vitesse ou de scalaire jouent un rôle crucial. Or en LES, les corrélations spatiales ou temporelles sont surestimées. Le manque de prise en compte des fluctuations des petites échelles de sous-maille, induit une échelle caractéristique en temps ou en espace trop longue. Une correction du champ Lagrangien de vitesse des grandes échelles est alors nécessaire.

Le but de cette thèse est de prendre en compte les effets des fluctuations de vitesse de sous-maille dans l'approche Lagrangienne pour la dispersion turbulente avec des nombres de Schmidt élevés. Dans ce travail de thèse, par analogie à la modélisation classique stochastique du champ turbulent dans l'approche statistique, nous avons développé une modélisation stochastique Lagrangienne du champ de vitesses de sous-maille.

En premier lieu, à travers les études comparatives par simulation directe et par simulation des grandes échelles, nous avons mis en lumière les effets des vitesses de sousmaille sur les différentes corrélations, Eulériennes et Lagrangiennes, et sur les échelles caractéristiques en temps et en espace. Ensuite, nous avons introduit un modèle stochastique Lagrangien de sous-maille. Le champ Lagrangien de vitesse est ainsi reconstitué dans une simulation des grandes échelles. L'apport de cette modélisation est discuté sur les grandeurs telles que les corrélations Lagrangiennes et les temps caractéristiques Lagrangiens. A la fin, nous avons appliqué ce modèle stochastique Lagrangien de sous-maille dans l'étude de la dispersion turbulente Lagrangienne par simulation des grandes échelles. La prise en compte de l'effet du nombre de Schmidt est également étudiée à l'aide d'un modèle de mélange Lagrangien.

Les résultats marquant de cette thèse sont énumérés ci-dessous.

(1) En simulation des grandes échelles, les corrélations spatio-temporelles Eulériennes sont plus grandes que celles qui sont issues d'une simulation directe. Ce résultat est cohérent avec ceux de la littérature.

(2) En simulation des grandes échelles, les corrélations spatio-temporelles Lagrangiennes sont également surestimées. Cela induit des temps caractéristiques Lagrangiens trop grands en LES. Le manque de l'influence des petites échelles Lagrangiennes ne permet pas de prendre en compte l'effet de destruction de cohérence des gros tourbillons de manière correcte.

(3) Une modélisation stochastique Lagrangienne est introduite pour prendre en compte l'absence de champ Lagrangien de vitesse de sous-maille.

(4) Cette modélisation stochastique de sous-maille permet de reconstituer le champ Lagrangien complet de vitesse (grandes échelles simulées + petites échelles de sous-maille modélisées). Elle apporte une nette amélioration sur les corrélations et les temps caractéristiques du champ Lagrangien. L'apport est plus important dans le cas d'un grand nombre de Reynolds et aussi dans le cas où la résolution en LES est plus grossière (plus des petites échelles de sous-maille).

(5) Les tests de ce modèle ont été réalisés dans l'étude de la dispersion Lagrangienne par LES, d'un scalaire dans une turbulence homogène (expérience de Huq et Britter [4]) et dans une turbulence inhomogène (expérience de Zhang XH [1]). Un modèle de mélange Lagrangien de Curl [69] est utilisé pour tenir compte de l'effet du nombre de Schmidt.

(6) Les résultats des tests, confrontés aux résultats expérimentaux, montrent que le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille apporte une amélioration importante sur la prédiction de la dispersion Lagrangienne. Les profils de concentration moyenne, de fluctuations de scalaire et de flux de masse (corrélation vitesse-scalaire) sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

(7) Les résultats de simulation dans le cas de l'expérience de couche de mélange sans cisaillement montrent que, le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille, développé dans le cadre de turbulence homogène, est capable de s'adapter à l'inhomogénéité spatiale.

(8) Une étude du coefficients R du modèle d'échange a été réalisée. Nous montrons qu'avec la valeur de R = 2 pour un petit nombre de Schmidt ($Sc \approx 1$) et R = 4 pour un grand nombre de Schmidt, sont appropriées pour simuler en LES les écoulements à grand nombre de Schmidt, du moins pour un nombre Schmidt de 10^6 .

En conclusion, nous avons montré dans cette thèse, la nécessité de la prise en compte des petites échelles de sous-maille dans l'approche Lagrangienne pour la dispersion turbulente. Le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille est développé avec succès. Ce modèle permet de reconstituer le rôle des échelles de sous-maille sur la dispersion Lagrangienne d'espèces.

Dans le futur, des améliorations possibles de cette modélisation peuvent être envisagées. Nous n'avons utilisé une seule échelle de temps, mais il est tout à fait possible d'introduire plusieurs échelles de temps pour les échelles de sous-maille. Quant à la prise en compte de l'effet du nombre de Schmidt et du nombre de Reynolds dans le modèle Lagrangien de mélange, il serait intéressant de comparer à d'autres expériences avec d'autres nombres de Reynolds et Schmidt, en utilisant la simulation des grandes échelles couplée avec le modèle stochastique Lagrangien de sous-maille.

Annexes

Annexe I

Interpolation

En simulation numérique, on doit discrétiser les équations de Navier-Stokes. Les valeurs discrètes obtenues, plus précisément les vitesses, correspondent aux noeuds du maillage numérique, et on ne connait pas celles qui sont hors des noeuds de maillage.

Pour le problème de suivi des particules, on doit connaître les positions et les vitesses de toutes particules dans tout l'espace. Quand les particules ne sont pas en des points du maillage, on doit alors utiliser une méthode d'interpolation pour obtenir les vitesses correspondantes.

Pour cette étude, on a choisit la méthode d'interpolation utilisant les polynômes de Lagrange de degré 7. Le choix du degré 7 est issu de différents essais. En dessous du 7, les erreurs sont plus importantes; et en dessus du 7, le temps de calcul est de plus en plus long, mais la précision d'interpolation n'augmente plus.

Pour une fonction f(x), la formule d'interpolation avec les polynômes de Lagrange en dimension 1 peut s'écrire:

$$l_i(x) = \prod_{j=0 \ et \ j \neq i}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$
(I.1)

Ici x est la position d'interpolation, $x_0, ..., x_n$ les points de discrétisation, et les $l_i(x)$ les coefficients pour chaque point. La valeur d'interpolation à la position x est fournie par:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i \, l_i(x)$$
(I.2)

où f_i est la valeur de f(x) sur les points discrets.

Cette méthode est précise et facile à utiliser. Nous utilisons 8 noeuds dans une dimension, 4 de chaque côté du point considéré. On va donc chercher une région autour de la position à interpoler. Si les particules sont près de la frontière, il faut alors utiliser la condition limite de périodicité.

Généralement, l'interpolation est faite en dimension 1, mais notre problème est à 3 dimensions. On va donc répéter la même opération trois fois dans les 3 dimensions. On utilise donc les informations provenant des 8^3 points.



Figure I.1: Interpolation par les polynômes de Lagrange en 3 dimensions.

Nous avons aussi comparé l'interpolation en 3 dimensions dans différents ordres:

$$\begin{split} X &\to Y \to Z \; ; \; X \to Z \to Y \; ; \\ Y &\to X \to Z \; ; \; Y \to Z \to X \; ; \\ Z &\to X \to Y \; ; \; Z \to Y \to X \; . \end{split}$$

Les différences entre les 6 situations sont minimes. La première méthode a été finalement retenue. Comme les erreurs sont très petites, pour le problème de suivi de particules, la précision est suffisante. On considère alors que les erreurs viennent essentiellement de la simulation du champ de vitesse.

Annexe II

Filtre

Trois filtrages spatiaux sont les plus utilisés (Sagaut [8]):

• Le filtre boîte (box filter, top-hat filter).

$$G(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3} & si \ |x_i - x'_i| \le \frac{\Delta}{2} \\ \\ 0 & sinon. \end{cases}$$
(II.1)

$$\widehat{G}(\mathbf{k}) = \frac{\sin(\mathbf{k}\,\Delta/2)}{\mathbf{k}\,\Delta/2} \tag{II.2}$$

où, \bigtriangleup est la taille moyenne de la maille,

$$\triangle = (\triangle x \, \triangle y \, \triangle z)^{1/3}$$

• Le filtre gaussien (gaussian filter).

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = (\frac{6}{\pi})^{3/2} \frac{1}{\Delta^3} exp(-6\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{x}')^2}{\Delta^2})$$
(II.3)

$$\widehat{G}(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{-\Delta^2 \,\mathbf{k}^2}{24}\right) \tag{II.4}$$

• Le filtre porte (le filtre droit, le filtre passe-bas, spectral cut-off filter, sharp cut-off filter).

$$G(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{\sin(K_c(\mathbf{x}-\mathbf{x}'))}{K_c(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}$$
(II.5)

$$\widehat{G}(\mathbf{k},t) = \begin{cases} 1 \ si \ |\mathbf{k}| \le K_c \\ 0 \ sinon. \end{cases}$$
(II.6)

ici, ${\bf k}\,$ est le nombre d'onde, et $K_c\,$ le nombre d'onde de coupure.

Annexe III

Nombres aléatoires

III.1 Variables aléatoires uniformes

Les calculs ont été effectués sur le matériel PC, Mercure du LMFA et NEC SX-5 d'IDRIS. On peut alors utiliser directement un processus aléatoire (rand(0) sur PC et Mercure, et rand(1) sur NEC SX-5) censé donner une variable aléatoire suivant une loi uniforme sur l'intervalle [0, 1].

III.2 Variables aléatoires normales

On peut alors construire une variable aléatoire suivant une loi normale, c'est à dire dont la densité de probabilité (d.d.p.) est gaussienne, nulle en moyenne, et dont l'écart type est égal à l'unité:

$$\begin{cases} \overline{\xi_i} = 0\\ \overline{\xi_i^2} = 1\\ \overline{\xi_m \xi_n} = 0, \ m \neq n. \end{cases}$$

Nous avons utilisé la fonction suivante pour générer les variables aléatoires suivant la

loi normale:

$$\xi_i = \overline{\xi_i} + \overline{\xi_i^2} \left(-6 + \chi_1 + \chi_2 + \dots + \chi_{12} \right)$$
(III.1)

 $\{\chi_i\}$ est une série des variables aléatoires suivant une loi uniforme sur l'intervalle [0,1]. Dans ce cas, $\overline{\xi_i}$ égal à 0, et $\overline{\xi_i^2}$ est 1.

Bibliographie

- Ayrault M. Simoens S. Zhang X. H., Zhang Z. S. and Laadhari F. Experimental study on passive scalar diffusion in a turbulent shearless mixing-layer by mie scattering diffusion and piv. Optical Technology and Image Processing For Fluids and Solids Diagnostics SPIE-Beijing, 2002.
- [2] Zhang Xiaohang. Thèse de Zhang Xiaohang. La diffusion de scalaire passif dans une turbulence inhomogène. 2003.
- [3] K. R. Sreenivasan D. A. Donzis and P. K. Yeung. Scalar dissipation rate and dissipative anomaly in isotropic turbulence. J. Fluid Mech., 532:199–216, 2005.
- [4] Pablo Huq and Rex E. Britter. Mixing due do grid-generated turbulence of a twolayer scalar profile. J. Fluid Mech., 285:17–40, 1995.
- [5] Y. Kaneda and T. Ishihara. Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in periodic box. *Physics of Fluids*, pages L21–L24, 2003.
- [6] Eswaran V. and Pope S.B. An examination of forcing in direct numerical simulation of turbulence. *Computers and Fluids*, 16 (3):257–278, 1988.
- [7] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30:301–305, 1941.
- [8] Pierre Sagaut. Introduction à la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible.
- [9] J. Smagorinsky. Global atmospheric modeling and the numerical simulation of climate. *Weather and Climate Modification*, 1974.

- [10] J. P. Chollet and M. Lesieur. Parameterisation for small scales of three dimensional isotropic turbulence using spectral closure. J. Atmos. Sci., 38:2747–2757, 1981.
- [11] G. Cui, H. Zhou, Z. Zhang, and L. Shao. A new dynamic subgrid eddy vicosity model with application to turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, 16(8), 2004.
- [12] J.P. Chollet. Turbulence tridimensionnelle isotrope: modélisation statistique des petites échelles et simulations numériques des grandes échelles. Thèse de doctorat, Université Scientifique et médicale de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1984.
- [13] Monin and Yaglom. Statistical Fluid Mechanics, volume 1. 1965.
- [14] Hinze. Turbulence.
- [15] M. Lesieur. Turbulence in Fluids.
- [16] Peter S. Bernard and A. L. Rovelstad. On the physical accuracy of scalar transport modeling in inhomogeneous turbulence. *Phys. Fluids*, 6(9):3093–3108, 1994.
- [17] D.J. Thomson. A stochastic model for the motion of particle pairs in isotropic highreynolds-number turbulence, and its application to the problem of concentration variance. J. Fluid Mechanics, 210:113–153, 1990.
- [18] Jung Il Choi, Kynogmin Yeo, and Changhoon Lee. Lagrangeian statistics in turlublent channel flow. *Physics of Fluids*, 16(3), 2004.
- [19] P. K. Yeung and S.B. Pope. An algorithm for tracking fluid particles in numerical simulations of homogeneous turbulence. *Journal of Computational Physics*, 79:373– 416, 1988.
- [20] K. Kontomaris, T. J. Hanratty, and J. B. McLaughlin. An algorithm for tracking fluid particles in a spectral simulation of turbulent channel flow. *Journal of Computational Physics*, 103:231–242, 1992.
- [21] S. Balachandar and M. R. Maxey. Methods for evaluating fluid velocities in spectral simulations of turbulence. J. Fluid Mech., 5:113–139, 1958.
- [22] R.S. Rogallo. Numerical experiments in homogeneous turbulence, 1981.

- [23] Genevieve Comte-Bellot and Stanley Corrsin. The use of contraction to improve the isotropy of grid generated turbulence. J. Fluid Mech., 25(3):657–682, 1966.
- [24] Shao Liang. Thèse de Shao. Etude d'une couche de mélange turbulente non cisaillée par simulation des grandes échelles. 1992.
- [25] E. Inoue. On the lagrangian correlation coefficient for turbulent diffusion and its application to atmospheric diffusion phenomena. *Geophys. Res. Pap.*, 19:397–412, 1952.
- [26] E. Inoue. The effects of thermal stratification on turbulent diffusion in the atmospheric surface layer. Adv. Geophys., 6:319–330, 1959.
- [27] Y. Kaneda and T. Gotoh. Lagrangian velocity autocorrelation in isotropic turbulence. *Phys. Fluids A*, 3(8):1924–1933, 1991.
- [28] Y. Kaneda. Lagrangian and eulerian time correlations in turbulence. Phys. Fluids A, 5(11):2835–2845, 1993.
- [29] Y. Kaneda, T. Ishihara, and K. Gotoh. Taylor expansions in powers of lagrangian and eulerrian two-point two-time velocity correlations in turbulence. *Physics of Fluids*, pages 2154–2166, 1999.
- [30] P. K. Yeung and S.B. Pope. Lagrangian velocity statistics obtained from direct numerical simulations of homogeneous turbulence.
- [31] P. K. Yeung. Lagrangian characteristics of turbulence and scalar transport in direct numerical simulations. *Journal of Fluids Engineering*, 427:241–274, 2001.
- [32] P. K. Yeung. Langrangian investigations of turbulence. Annual Review of Fluid Mechanics, 34:115–42, 2002.
- [33] P. K. Yeung and S.B. Pope. Lagrangian statistics from direct numerical simulations of isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 207:531–586, 1989.
- [34] Benoit Oesterle and Leonid I. Zaichik. On lagrangian time scale and particle dispersion medeling in equilibrium turbulent shear flows. *Physics of Fluids*, 16(9), 2004.
- [35] Robert Rubinstein Guowei HE and Lianping Wang. Effects of subgrid scale modeling on time correlations in large eddy simulation. *Physics of Fluids*, 14(7), 2002.

- [36] G. He, M. Wang, and Sanjiva K. Lele. On the computation of space-time correlations by large-eddy simulation. *Center for Turbulence Resarch, Annual Research Briefs*, pages 319–330, 2003.
- [37] Y. Kaneda. Renormalized expansions in the theory of turbulence with the use of the lagrangian position function. J. Fluid Mech., 107:131–145, 1981.
- [38] J. N. Gence. Transport et mélange. Cours de D.E.A., 1990.
- [39] Genevieve Comte-Bellot and Stanley Corrsin. Simple eulerian time correlation of full- and narrow-band velocity signals in grid-generated, 'isotropic' turbulence. J. Fluid Mech., 48(2):273–337, 1971.
- [40] Kyle D. Squires and John K. Eaton. Lagrangian and eulerian statistics obtained from direct numerical simulations of homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, A 3 (1), 1991.
- [41] Toshiyuki Gotoh, Robert S. Rogallo, Jackson R. Herring, and Robert H. Kraichnan. Lagrangian velocity correlations in homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, A, 5(11), 1993.
- [42] P. K. Yeung. Direct numerical simulation of two-particle relative diffusion in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 6(10):3416–3427, 1994.
- [43] Jean-Pierre Bertoglio. Thèse de doctorat d'Etat. 1986.
- [44] N. Wiener. Differential space. J. Math. Phys., 58:131–174, 1923.
- [45] P. Langevin. On the theory of brownian motion. C. R. Acad. Sci. Paris, 146:530– 533, 1908.
- [46] J. L. Lumley. The mathematical nature of the problem of relating lagrangian and eulerian statistical functions in turbulence. The Mechanics of Turbulence Gordon and Breach, pages 17–26, 1962.
- [47] G. Taylor. Diffusion by continuous movements. Scientific Paper, Cambridge University Press., 2:172–184, 1921.
- [48] R. G. Lamb and W. R. Shu. A model of second-order chemical reactions in turbulent fluid - part i. formulation and validation. *Atmospheric Environment*, 12:1685–1694, 1978.

- [49] S.B. Pope. P.d.f. methods for turbulent reactive flows. Prog. Energy combust. Sci., 11:119–192, 1985.
- [50] Christophe Michelot. Thèse de Michelot. Développement d'un modèle stochastique Lagrangien Application à la dispersion et à la chimie de l'atmospère. 1996.
- [51] D.J. Thomson. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulence flows. J. Fluid Mechanics, 180:529–556, 1987.
- [52] B.L. Sawford. Reynolds number effects in lagrangian stochastic models of turbulence dispersion. *Phys. Fluids A*, 3(6):1577–1586, 1991.
- [53] Shuming Du, Brian L. Sawford, John D. Wilson, and David J. Wilson. Estimation of the kolmogorov constant (c_0) for the lagrangian structure function, using a second-order lagrangian model of grid turbulence. *Physics of Fluids*, 7(12):3083–3090, 1995.
- [54] B. L. Sawford and P. K. Yeung. Lagrangian statistics in uniform shear flow: Direct numerical simulation and lagrangian stochastic models. *Physics of Fluids*, 13(9):2627–26343, 2001.
- [55] C. D. Hall. The simulation of particle motion in the atmosphere by a numerical random-walk model. Quart. J. R. Met. Soc., 101:235–244, 1975.
- [56] J. D. Reid. Markov chain simulations of vertical dispersion in the neutral surface layer for surface and elevated releases. *Boundary-Layer Meteorol.*, 16:3–22, 1979.
- [57] P.A. Durbin. A stochastic model of two-particle dispersion and concentration fluctuations in homogeneous turbulence. J. Fluid Mech., 100:279–302, 1980.
- [58] G. W. Thurtell G. E. Wilson and G. E. Kidd. Numerical simulation of particle trajectories in inhomogeneous turbulence. *Boundary-Layer Meteorol.*, 21:423–441, 1981.
- [59] B. J. Legg and M. R. Raupach. Markov-chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: the mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boundary-Layer Meteorol.*, 24:3–13, 1982.
- [60] A. J. Ley. A random walk simulation of two-dimentional turbulent diffusion in the neutral surface layer. Atmospheric Environment, 16(12):2799–2808, 1982.

- [61] A. J. Ley and D. J. Thomson. A random walk model of dispersion in the diabatic surface layer. Quart. J. R. Met. Soc., 109:847–880, 1983.
- [62] H. Van Dop. Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unstedy turbulent flows. *Phys. Fluids*, 28(6):1639–1653, 1985.
- [63] Ilias Iiopoulos and Thomas J. Hanratty. A non-gaussian stochastique model to describe passive tracer dispersion and its comparison to a direct numerical simulation. *Physics of Fluids*, 16(8), 2004.
- [64] A. Yoshizawa. A statistically-derived subgrid model for the large-eddy simulation of turbulence. *Physics of Fluids A*, 3(8):2007–2009, 1991.
- [65] K. Horiuti. Large eddy simulation of turbulent channel flow by one-equation modeling. J. Phys. Soc. Japan, 54(8), 1985.
- [66] J. W. Deardorff. Stratocumulus-capped mixed layers derived from a threedimensional model. *Boundary-Layer Meteorology*, 18:495–527, 1980.
- [67] J. W. Deardorff. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. *Journal of Fluids Engineering*, pages 429–438, 1973.
- [68] A.M. Reynolds. Lagrangian stochastic modeling of anomalous diffusion in twodimensional turbulence. *Physics of Fluids*, 14(12), 2002.
- [69] R. Curl. Dispersed phase mixing. i. theory and effects in simple reactors. A. I. Ch. E. Journal, 9(2), 1963.
- [70] Hsu A. T. and Chen J. Y. A continuous mixing model for p.d.f. simulation and its applications to combusting shear flows. *Eighth Symposium on turbulenct shear flows*, pages 22.4.1–22.4.5, 1991.
- [71] C. Dopazo and E. O'Brien. An approach to the autognition of a turbulent mixture. Acta Astronautica, 1:1239–1266, 1974.
- [72] Spalding D. B. Concentration fluctuation in a round turbulent free jet. Chem. Engng Sci., 26:95–107, 1971.
- [73] R. O. Fox. The spectral relaxation model of the scalar dissipation rate in homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, 7(5), 1995.

- [74] R. O. Fox. The lagrangian spectral relaxation model of the scalar dissipation in homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, 9(8), 1997.
- [75] T. Watanabe and T. Gotoh. Statistics of passive scalar in homogeneous turbulence. New J. Phys., 6(40), 2004.
- [76] M.S. Borgas and B.L. Sawford. Molecular diffusion and viscous effects on concentration statistics in grid turbulence. J. Fluid Mech., 324:25–54, 1996.
- [77] S. Veeravalli and Z. Warhaft. The shearless turbulence mixing layer. J. Fluid Mech., 207:191–229, 1989.
- [78] S. Veeravalli and Z. Warhaft. Thermal dispersion from a line source in the shearless turbulence mixing layer. J. Fluid Mech., 216:35–70, 1990.
- [79] R. A. Antonia, T. Zhou, and G. Xu. Second-order temperature and velocity structure functions: Reynolds number dependence. *Physics of Fluids*, 12(6):1509–1517, 2000.
- [80] Wm.T. Ashurst, A.R. Kerstein, and L.M. Pickett. Passive scalar mixing in a spatially developing shear layer : comparison of one-dimensional trubulence simulations with experimental results. *Physics of Fluids*, 15(2):579–582, 2003.
- [81] G.K. Batchelor. Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. *Journal of Computational Physics*, 83:96–125, 1989.
- [82] J.P. Bertoglio, K. Squires, and J.H. Ferziger. Edqnm closure : a homogeneous simulation to support it, a quasi-homogeneous simulation to disprove it. *Proceeding* of the Summer Program, 1987.
- [83] Jean-Pierre Bertoglio. Simulation des grandes échelles de la turbulence.
- [84] Eric G. Blackman and George B. Field. A new approach to turbulent transport of a mean scalar. *Physics of Fluids*, 2003.
- [85] BURKHARD M. O. HEPPE. Generalized langevin equation for relative turbulent dispersion. Journal of Fluid Mechanics, 357:167–198, 1998.
- [86] Chong M. Cha and Philippe Trouillet. A model for the mixing time scale of a turbulent reacting scalar. *Physics of Fluids*, 15(6), 2003.

- [87] Chong M. Cha and Philippe Trouillet. A subgrid-scale mixing model for large-eddy simulations of turbulent reacting flow using the filtered density function. *Physics of Fluids*, 15(6), 2003.
- [88] S. Corrsin. Progress report on some turbulent diffusion research.
- [89] J. W. Deardorff and R. L. Peskin. Langrangian statistics from numerically integrated turbulent shear flow. *Physics of Fluids*, 13(3), 1970.
- [90] P.A. Durbin. A random flight model of inhomogenous turbulent dispersion. *Physics of Fluids*, 23(11):2151–2153, 1979.
- [91] Gregory L. Eyink. Fluctuation-response relations for multitime correlations. *Phys-ical Review E*, 62(1), 2000.
- [92] P. Flohr and J. C. Vassilicos. A scalar subgrid model with flow structure for largeeddy simulations of scalar variances. J. Fluid Mech., 407:315–349, 2000.
- [93] R. O. Fox. The lagrangian spectral relaxation model for differential diffusion in homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, 11(6), 1999.
- [94] A. Noullez U. Frisch, A. Mazzino and M. Vergassola. Lagrangian method for multiple correlations in passive scalar advection. *Physics of Fluids*, 11(8), 1999.
- [95] G. Haller. Lagrangian coherent structures from approximate velocity data. Physics of Fluids, 14(6), 2002.
- [96] Ilias Iiopoulos and Thomas J. Hanratty. Turbulent dispersion in a non-homogeneous field. J. Fluid Mech., 392:45–71, 1999.
- [97] James J. Riley and Jr. G. S. Patterson. Diffusion experiments with numerically integrated isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 17(2), 1974.
- [98] Steve Shkoller Kamran Mohseni, Branko Kosovic and Jerrold E. Marsden. Numerical simulations of the lagrangian averaged navier-stokes equations for homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 15(2):524–544, 2003.
- [99] U. Karnik and S. Tavoularis. Lagrangian correlations and scales in uniformly sheared turbulence. *Physics of Fluids*, A 2(4):587–591, 1990.

- [100] J.-P. Laval, B. Dubrulle, and J.C. McWilliams. Langevin models of turbulence : Renormalization group, distant interaction algorithms or rapid distortion theory? *Physics of Fluids*, 15(5):1327–1339, 2003.
- [101] Leonid I. Zaichik and Vladimir M. Alipchenkov. Paie dispersion and preferential concentration of particles in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 15(6):1776– 1787, 2003.
- [102] Ren-Chieh Lien, Eric A. D'Asard, and Geoffrey T. Dairiki. Lagrangian frequency spectra of vertical velocity and vorticity in high-reynolds-number oceanic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 362:177–198, 1998.
- [103] Cristian Marchioli and Alfredo Soldati. Mechanisms for particle transfer and segregation in a turbulent boundary layer. Journal of Fluid Mechanics, 468:283–315, 2002.
- [104] Mark Nelkin and M. Tabor. Time correlations and random sweeping in isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, A(2)(1), 1990.
- [105] Maurizio Quadrio. Integral space-time scales in turbulent wall flows. Physics of Fluids, 15(8):2219–2227, 2003.
- [106] C. Meneveau, T.S. Lund, and W.H. Cabot. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. J. Fluid Mech., 319:353–385, 1996.
- [107] Michael S. Borgas and Brian L. Sawford. A lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. J. Fluid Mech., 324:25–54, 1996.
- [108] Mohamed Gad el Hak. The fluid mechanics of microdevices. Journal of Fluids Engineering, 121:5–13, 1999.
- [109] L. Mydlarski and Z. Warhaft. Passive scalar statistics in high-peclet-number grid turbulence. J. Fluid Mech., 358:135–175, 1998.
- [110] Nadeem A. Malik and J. C. Vassilicos. A langrangian model for turbulent dispersion with turbulent-like flow structure: Comparison with direct numerical simulation for two-particle statistics. *Physics of Fluids*, 11(6), 1999.
- [111] K. Ohkitani and P. Constantin. Numerical study of the eulerian-lagrangian formulation of the navier-stokes equations. *Physics of Fluids*, 15(10):3251–3254, 2003.

- [112] M.R. Overholt and S.B. Pope. Direct numerical simulation of a passive scalar with imposed mean gradient in isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, 8(11):3128–3148, 1996.
- [113] S.B. Pope. Lagrangian pdf methods for turbulent flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 26:23–63, 1994.
- [114] J. Pozorski and J. P. Minier. On the lagrangian turbulent dispersion models based on the langevin equation. *International Journal of Multiphase Flow*, 24:913–945, 1998.
- [115] Ren-Chieh Lien and Eric A. D'Asaro. The kolmogorov constant for the lagrangian velocity spectrum and structure function. *Physics of Fluids*, 14(12), 2002.
- [116] A.M. Reynolds. Third-order lagrangian stochastic modeling. Physics of Fluids, 15(9):2773–2777, 2003.
- [117] James J. Riley and G.S. Patterson. Diffusion experiments with numerically integrated isotropic turbulence. *Physics of Fluids*, 17(2):292–297, 1974.
- [118] Amy L. Rovelstad, Robert A. Handler, and Petter S. Bernard. The effect of interpolation errors on the lagrangian analysis of simulated turbulent channel flow. *Journal of Computational Physics*, 110:190–195, 1994.
- [119] Robert Rubinstein and Ye Zhou. Effects of helicity on lagrangian and eulerian time correlations in turbulence. *Physics of Fluids*, 11(8), 1999.
- [120] Y. Sato and K. Yamamoto. Lagrangian measurement of fluid-particle motion in an isotropic turbulent field. J. Fluid Mech., 175:183–199, 1987.
- [121] R. Schiestel. Modélisation et simulation des écoulement turbulents. Traité des nouvelles technologies, Serie Mécanique, ISSN 0986-4873, 1993.
- [122] Shraiman, Boris I., Siggia, and Eric D. Scalar turbulence. Nature, 405(6787), 2000.
- [123] A. Sirivat and Z. Warhaft. The effect of a passive cross-stream temperature gradient on the evolution of temperature variance and heat flux in grid turbulence. J. Fluid Mech., 128:323–346, 1983.
- [124] STEVEN A. ORSZAG. Analytical theories of turbulence. Journal of Fluid Mechanics, 41(2):363–386, 1970.

- [125] G. Stolovitzky, P. Kailasnath, and K.R. Sreenivasan. Refined similarity hypotheses for passive scalars mixed by turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 297:275–291, 1995.
- [126] H. TENNEKES. Eulerian and lagrangian time microscales in isotropic turbulence. Journal of Fluid Mechanics, 67(3):561–567, 1975.
- [127] Traian Iliescu. Large eddy simulation of turbulent channel flows by the rational large eddy simulation model. *Physics of Fluids*, 15(10):3036–3047, 2003.
- [128] T. Ushijima, Y. Hu, and O. Kitoh. Numerical investigation of the relationship between lagrangian and eulerian statistics in a turbulent channel flow. *Turbulence*, *Heat and Mass Transfer 4*, pages 165–172, 2003.
- [129] I. Vinkovic, C. Aguirre, S. Simoens, and J. N. Gence. Couplage d'un modèle stochastique lagrangien sous-maille avec une simulation grandes échelles. Académie des sciences mécanique, 2005.
- [130] P. Vedula, P. K. Yeung, and R. O. Fox. Dynamics of scalar dissipation in isotropic turbulence: a numerical and modelling study. J. Fluid Mech., 433:29–60, 2000.
- [131] Ugo Piomelli Vincenzo Armenio and Virgilio Fiorotto. Effect of the subgrid scale on particle motion. *Physics of Fluids*, 11(10):3030–3042, 1999.
- [132] K. K. Droegemeier M. Xue and V. Wong. The advanced regional prediction system (arps) - a multi-scale nonhydrostatic atmospheric simulation and prediction model. part i: Model dynamics and verification. *Meteorol. Atmos. Phys.*, pages 161–193, 2000.
- [133] P. K. Yeung. One- and two-particle lagrangian acceleration correlations in numerically simulated homogeneous turbulence. *Physics of Fluids*, 9(10), 1997.
- [134] P. K. Yeung. Correlations and conditional statistics in differential diffusion: Scalars with uniform mean gradients. *Physics of Fluids*, 10(10), 1998.
- [135] Zhang Zhaoshun. Turbulence.