

Simulation numérique des grandes échelles d'un jet propulsif
en sortie de moteur d'avion avec modélisation microphysique
des particules de glace

par

Sitraka RAZANAMPARANY

THÈSE PRÉSENTÉE À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION
DU DOCTORAT EN GÉNIE
Ph.D.

MONTRÉAL, LE 07 JUILLET 2021

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Sitraka RAZANAMPARANY, 2021



Cette licence Creative Commons signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette oeuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'oeuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CETTE THÈSE A ÉTÉ ÉVALUÉE

PAR UN JURY COMPOSÉ DE:

M. François Garnier, directeur de thèse
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Emmanuel Montreuil, co-directeur
Direction des systèmes d'information outils scientifiques et techniques à ONERA

M. Robert Hausler, président du jury
Département de génie de la construction à l'École de technologie supérieure

M. François Morency, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Stéphane Vincent, examinateur externe indépendant
Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Échelle
Université Gustave Eiffel

ELLE A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 24 JUIN 2021

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, Monsieur François Garnier, professeur en génie mécanique, membre du laboratoire TFT et chercheur à l'ONERA, pour m'avoir donné l'opportunité d'effectuer cette thèse dans le Laboratoire de l'ÉTS ainsi que pour tous les aides et conseils relatifs aux missions évoquées dans ce rapport. Je le remercie aussi pour le support financier, pour son entière confiance octroyée tout le long de ce périple, et surtout pour les temps passés à discuter des thèmes scientifiques ou non. J'adresse également aussi tous mes remerciements à mon codirecteur, Monsieur Emmanuel Montreuil, pour ces aides précieuses lors du développement du code et pour sa bonne humeur. Grand merci à eux de m'avoir redonné du cœur à l'ouvrage dans tous les moments difficiles.

Je remercie chaleureusement Monsieur Bart Oldeman pour son aide précieuse lors de la parallélisation du code FULDILES ainsi que pour le temps accordé pour l'optimisation du code. Je le remercie également pour son soutien, son attention, sa patience et son investissement sans réserve pour ce projet.

Je remercie chaleureusement ma famille surtout mes parents qui m'ont toujours soutenu tout au long de mes études malgré la distance. Leur accompagnement ainsi que leur confiance m'ont été si précieux durant mon doctorat.

Je tiens également à témoigner tous mes remerciements et reconnaissances à Monsieur Jonathan Brulatout, doctorant, membre du laboratoire TFT pour les expériences enrichissantes et pleines d'intérêt durant ces années au sein de l'école, sans oublier son soutien et ses conseils avisés, sa totale confiance, le temps consacré tout au long de ce projet et son accompagnement infailible durant le cheminement de ce rapport

Tous mes sincères remerciements à l'équipe de travail composée de Trung Hieu Nguyen, Thomas, Mohamed, Alexandre, Pierre -Lou pour leur aide et leur bonne humeur, mais également pour les plaisanteries pendant les déjeuners et les pauses café.

Un grand merci aussi à Marie-Lou, Matthieu, Marion, Mariana, Georges et Marine pour les bons moments passés au cours de ces années et leur soutien inconditionnel. Leur support a été important surtout vers la fin et durant ces temps incertains de pandémie.

Simulation numérique des grandes échelles d'un jet propulsif en sortie de moteur d'avion avec modélisation microphysique des particules de glace

Sitraka RAZANAMPARANY

RÉSUMÉ

L'importance mondiale accordée aux problèmes environnementaux et la perspective d'une croissance future du trafic aérien ont conduit la plupart des pays développés à lancer d'importants programmes de recherche de l'impact de l'aviation sur l'environnement. Le premier concerne l'impact sur le réchauffement climatique. Ce dernier a été suivi par la mise en place de mesures réglementaires réduisant essentiellement la pollution locale. Plus récemment, la pollution en altitude est devenue un sujet de recherche majeur. Ce dernier impact a été étudié par certains auteurs comme Paoli & Garnier (2005b) ; cette étude a montré que le processus de formation des traînées de condensation est principalement contrôlé par l'entraînement du jet, le vortex et la diffusion turbulente du jet. De plus, dans les études sur l'impact de l'aviation sur le changement climatique, l'impact des traînées de condensation est celui qui représente le plus d'incertitudes. Dans ce contexte, cette thèse vise à mieux comprendre les phénomènes microphysiques dans le panache de l'avion, ces derniers conditionnant les propriétés des cirrus induits.

L'objectif principal de la thèse est d'approfondir la compréhension de la formation et de la croissance des particules de glace en utilisant et modifiant un code de CFD de haute précision avec un modèle microphysique intégré afin de pouvoir modéliser la formation d'une traînée de condensation en altitude de vol.

La simulation des grandes échelles d'un jet turbulent a été largement étudiée au cours de la dernière décennie. Les conditions de non-réflexion ont été utilisées comme conditions aux limites pour les jets libres dans la grande majorité des cas. Le modèle dynamique de Smagorinsky (DSM) donne de bons résultats à faible nombre de Mach (0,2) et faible nombre de Reynolds. Dans notre travail, les simulations ont été effectuées à l'aide du code FLUDILES pour calculer un jet libre à pression atmosphérique et un nombre de Reynolds élevé (10^6). Dans un premier temps, une validation du jet, en utilisant le code FLUDILES, sera faite. Les résultats obtenus seront comparés aux résultats expérimentaux en termes de grandeurs moyennes et turbulentes. Dans la deuxième partie de la thèse, nous discuterons en détail des résultats de la simulation numérique de l'interaction jet/particules de suie en sortie de moteur à une altitude de croisière. Pour finir, nous nous concentrerons sur l'influence des caractéristiques du moteur sur la croissance des particules.

L'impact scientifique et technologique de ces travaux consiste à avoir une compréhension plus précise de l'influence des effluents émis par l'aviation actuelle sur l'environnement. L'outil numérique ainsi développé permettra potentiellement de faire des modifications techniques dès même la conception du moteur et par conséquent réduire l'empreinte environnementale des moteurs d'avion.

Mots-clés: trainées de condensation, turbulence, simulation des grandes échelles, environnement, jet, microphysique

Numerical simulation of the large scales of a turbulent jet exiting an aircraft engine with microphysical modeling of ice particles

Sitraka RAZANAMPARANY

ABSTRACT

The worldwide importance given to environmental problems and the prospect of future growth in air traffic led most developed countries to start important research programs on the aviation's impact on the environment. The first concerns the impact on the global warming. It was followed by the establishment of regulatory measures which essentially reduce local pollution. More recently, the pollution in altitude has become a major topic of research. This latter impact was studied by some authors such as Paoli & Garnier (2005b); the author showed that the interaction process is mainly controlled by entrainment of the jet by the vortex flow and the turbulent diffusion of the jet. Although, in studies of the impact of aviation on climate change, contrails influence are among the most uncertain on the climate. In this context, the study aims to better describe the microphysical phenomena of the plume in the near field of an aircraft, these being able to condition the properties of the formed contrails.

The main goal of the thesis is to deepen the understanding of the formation and growth of ice particles by using and modifying a high precision CFD code with an integrated microphysical model in order to understand the contrails formation at flight altitude.

The turbulent round free jet using LES was widely studied in the last decade. Non-reflective conditions are used as boundary conditions for free jets, also, dynamic Smagorinsky model (DSM) give good results at low Mach number (0.2) and low Reynolds number compared to experiment and DNS data. In our work, simulations were run using a multidimensional Navier-Stokes solver (FLUDILES), to compute a free jet at atmospheric pressure and realistic Reynolds number (10^6). First, the accuracy and the stability of the model will be discussed for the mesh size and boundary conditions. The flow field results will be compared with experimental correlations on the mean and turbulent quantities and analytics results. On the second part of the thesis, we will discuss in detail the results of high-resolution numerical simulations of jet/soot particle interaction that include microscale turbulent mixing. The last part of the thesis will focus on the influence of the engine design on the particle growth.

The essential scientific and technological impact of this work is to enable the precise understanding and quantification of the influence of effluents emitted by current aviation on the atmospheric environment. The digital tool thus developed will potentially allow technical modifications, from the very design of the engines and consequently reduce the environmental borrowing of aircraft engines.

Keywords: Contrail, Jet flow, Turbulence, Large Eddy Simulation, Particles, Microphysics

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE, PROBLÉMATIQUE ET OBJECTIFS	5
1.1 L'impact de l'aviation sur le réchauffement climatique	5
1.2 Les traînées de condensation	6
1.3 Enjeux de l'étude du jet en sortie du moteur	12
1.4 Le jet propulsif	13
1.4.1 Caractérisation	13
1.4.2 La simulation numérique du jet turbulent	15
1.5 Processus microphysique dans les contrails	18
1.5.1 Formation des cristaux de glace	18
1.5.1.1 Processus de formation des particules de glace	18
1.5.1.2 Forme des particules de glace	20
1.5.1.3 Processus de croissance des particules de glace	21
1.5.2 Modélisation numérique de la formation des traînées de condensation	22
1.6 Parallélisation	25
1.6.1 Les architectures de calcul	26
1.6.2 Les moyens de calcul haute performance actuels	27
1.6.3 Bibliothèque de parallélisation OpenMP	28
1.6.4 Accélération et efficacité	30
1.7 Objectifs des travaux de recherche	31
CHAPITRE 2 MODÉLISATION MATHÉMATIQUE ET NUMÉRIQUE	35
2.1 Équation de la phase gazeuse et solide	35
2.1.1 Équation de la phase gazeuse	35
2.1.2 Équation de la phase solide	38
2.2 Méthode numérique	41
2.2.1 Équations pour la simulation des grandes échelles	41
2.2.1.1 Définition et propriétés du filtre	41
2.2.1.2 Filtre de Favre	43
2.2.1.3 Équations filtrées	44
2.2.1.4 Modèles de sous-maillages	47
2.2.2 Méthode numérique	53
2.2.2.1 Discrétisation spatiale	53
2.2.2.2 Discrétisation temporelle	55
2.2.2.3 Conditions aux limites spatiales	57
2.2.2.4 Résolution des équations des particules	60
2.3 Parallélisation du code FLUDILES	62

2.3.1	Stratégie de parallélisation du code FLUDILES avec OpenMP	62
2.3.1.1	Accélération et efficacité	64
2.3.1.2	Comparaison entre les résultats OpenMP avec la version séquentielle	64
CHAPITRE 3 ÉTUDE D'UN JET SPATIAL TURBULENT POUR LA VALIDATION DE LA CONFIGURATION NUMÉRIQUE EN SIMULATION DES GRANDES ÉCHELLES		
		69
3.1	Introduction	69
3.2	Description du montage expérimental de Hussein et al. (1994).	70
3.3	Configuration numérique du jet d'air turbulent	71
3.4	Résultats	74
3.4.1	Similarité du jet d'air rond turbulent avec les résultats expérimentaux	74
3.4.1.1	Conditions de convergence pour avoir un écoulement développé et stationnaire	74
3.4.1.2	Champs moyens	74
3.4.1.3	Champs turbulents	76
3.4.1.4	Étude du spectre d'énergie cinétique turbulente	79
3.4.2	Structure du jet turbulent	80
3.4.3	Structure cohérente dans le jet turbulent	82
3.5	Bilan du chapitre	86
CHAPITRE 4 ÉTUDES DE LA FORMATION DES TRAÎNÉES DE CONDENSATION À LA SORTIE DU MOTEUR CFM56		
		89
4.1	Introduction	89
4.2	Configuration numérique du jet d'air turbulent et des particules en sortie de moteur	89
4.3	Résultats	91
4.3.1	Dynamique du transport des particules de suies dans le jet turbulent sans modèle microphysique.	91
4.3.2	Formation des cristaux de glace dans le jet turbulent en sortie de moteur	93
4.4	Bilan du chapitre	102
CHAPITRE 5 ÉTUDES PARAMÉTRIQUES DU TAUX DE DILUTION SUR DE LA FORMATION DES TRAÎNÉES DE CONDENSATION		
		105
5.1	Introduction	105
5.2	Spécifications générales du moteur	106
5.3	Configuration numérique	108
5.3.1	Configuration numérique pour l'étude paramétrique du double flux	108
5.3.2	Configuration numérique pour l'étude paramétriques du taux de dilution	111
5.4	Résultats et discussion	113

5.4.1	L'effet du flux secondaire sur la formations des traînées de condensation	113
5.4.2	L'effet du taux de dilution du moteur sur la formations des traînées de condensation	116
5.5	Bilan du chapitre	128
CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS		131
ANNEXE I	GRANDEURS THERMODYNAMIQUES	137
ANNEXE II	LES ÉQUATIONS FILTRÉES	139
ANNEXE III	LES SCHÉMAS DE DISCRÉTISATION SPATIALE	151
ANNEXE IV	CALCUL DES GRANDEURS TURBULENTES	163
ANNEXE V	LIMITEUR MSOU SUPERBEE (MONOTONIC SECOND ORDER UPWIND)	165
ANNEXE VI	PARALLÉLISATION DU CODE FLUIDILES AVEC MPI	167
BIBLIOGRAPHIE		174

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 3.1	Paramètres des calculs 71
Tableau 4.1	Paramètres des calculs pour un moteur A340-300 (Maglaras (2007)) 90
Tableau 5.1	Paramètre de la simulation pour le jet en sortie de tuyère 110
Tableau 5.2	Caractéristiques des trois moteurs : JT8D, CFM56, LEAP1A 112

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 0.1	Image d'une traînée de condensation derrière un avion..... 2
Figure 1.1	Représentation du critère de Schmidt-Appleman avec le diagramme $P_v(T)$: (a) Formation de traînées de condensation, (b) Non formation de traînées de condensation 7
	(a) 7
	(b) 7
Figure 1.2	Évolution dynamique d'une traînée de condensation (source : Guignery (2010b))..... 9
Figure 1.3	Instabilité de Crow (source : Brian Barrett) 11
Figure 1.4	Formation de " Puffs" dans une traînée de condensation (source : Brian Barrett) 12
Figure 1.5	Schéma du jet rond, reproduit de White & Corfield (1991)..... 14
Figure 1.6	Nucléation de la vapeur d'eau en gouttelettes et en cristaux : A déposition homogène, B liquéfaction homogène, C déposition hétérogène, D liquéfaction hétérogène, E solidification, F contact et G immersion. selon Picot (2013) 19
Figure 1.7	Évolution des particules de glaces selon Yang et al. (2010) 20
Figure 2.1	Accélération et efficacité de l'implémentation OpenMP 65
	(a) Accélération de l'implémentation OpenMP..... 65
	(b) Efficacité de l'implémentation OpenMP 65
Figure 2.2	Validation de la phase gazeuse 66
	(a) Vitesse axiale moyenne adimensionnée 66
	(b) Température moyenne adimensionnée 66
	(c) Épaisseur de quantité de mouvement 66
Figure 2.3	Validation de la phase dispersée..... 67
	(a) Nombre de particule saturée 67
	(b) Saturation moyenne des particules..... 67
	(c) Rayon moyen des particules..... 67
Figure 3.1	Représentation schématique du montage expérimental de Hussein et al. (1994) 70

Figure 3.2	Représentation schématique de la configuration de l'écoulement	72
Figure 3.3	Comparaison des tenseurs de reynolds $\langle v'v' \rangle / U_0^2$ en fonction du temps	75
Figure 3.4	Décroissance axiale de la vitesse axiale adimensionnée. Résultats numérique et des données expérimentales de (Hussein <i>et al.</i> (1994))	76
Figure 3.5	Décroissance radiale de la vitesse axiale adimensionnée dans la zone d'auto-similarité. Résultats numérique et de la littérature (Hussein <i>et al.</i> (1994) et Li et al. (2011c))	77
Figure 3.6	Tenseurs de Reynolds d'ordre deux adimensionnés	78
	(a) Tenseurs de reynolds $\langle v'v' \rangle / U_j^2$	78
	(b) Tenseurs de reynolds $\langle u'u' \rangle / U_j^2$	78
	(c) Tenseurs de reynolds $\langle w'w' \rangle / U_j^2$	78
	(d) Tenseurs de reynolds $\langle u'_r u'_r \rangle / U_j^2$	78
Figure 3.7	Spectre d'énergie cinétique turbulente	79
Figure 3.8	Champs instantané de la vitesse adimensionnée dans le domaine de calcul à $t=5$ s	81
Figure 3.9	Champs instantané de vorticité adimensionnée dans le domaine de calcul à $t=5$ s	82
Figure 3.10	Iso-surface de pression (bleu) et de masse volumique (rouge) à $t=5$ s	82
Figure 3.11	Iso-surface du critère Q et scalaire du critère Lambda 2 entre 1 et 5 s	85
	(a) 1 s	85
	(b) 1 s	85
	(c) 1,5 s	85
	(d) 1,5 s	85
	(e) 2.5 s	85
	(f) 2.5 s	85
	(g) 5 s	85
	(h) 5 s	85
Figure 4.1	Évolution des particules (points noir) a différent temps dans le champs de vorticité : (a) $t = 0.5$ s, (b) $t = 2$ s	92
	(a)	92
	(b)	92
Figure 4.2	Zoom de l'évolution des particules dans le champs de vorticité à $t = 0.5$ s	93

Figure 4.3	Évolution des particules avec le critère Q à $t = 2$ s	93
Figure 4.4	Évolution des particules de glaces (points blanc) et de suies (point noir) à différent temps dans le champs scalaire de la vitesse adimensionnée	94
	(a) 6 s	94
	(b) 6.5 s	94
	(c) 7 s	94
	(d) 7.5 s	94
Figure 4.5	Évolution des rayons adimensionnés des particules dans le domaine de calcul.....	95
	(a) 6 s	95
	(b) 6.5 s	95
	(c) 7 s	95
	(d) 7.5 s	95
Figure 4.6	Évolution spatiale du rayon moyen des cristaux de glace r_m à 9 s.....	97
Figure 4.7	PDF des rayons des particules à 9 s	98
Figure 4.8	Évolution spatiale de l'épaisseur optique τ à 9 s	99
Figure 4.9	Évolution spatiale de la température moyenne des particules à 9 s.....	101
Figure 4.10	Évolution spatiale de la masse moyenne des particules des particules à 9 s	102
Figure 5.1	Représentation schématique d'un moteur d'avion : (a) Double flux (b) Monoflux équivalent.....	108
Figure 5.2	Représentation du profil initial de vitesse pour les deux configurations : (a) Double flux (b) Monoflux équivalent	110
	(a)	110
	(b)	110
Figure 5.3	Spectre de l'énergie cinétique turbulente	111
Figure 5.4	Évolution temporelle du nombre de particules de glace pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent.....	114
Figure 5.5	Évolution temporelle du rayon moyen des cristaux de glace r_m pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent	116

Figure 5.6	Évolution temporelle de la saturation moyenne des particules de glace S_m pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent 117
Figure 5.7	Distribution des rayons de particules à différents temps après éjection du moteur CFM56 : la ligne pleine représente la configuration avec un double flux et la ligne discontinue représente la configuration avec un monoflux 118
Figure 5.8	Évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente pour les trois moteurs 119
Figure 5.9	Évolution temporelle de l'épaisseur de quantité de mouvement pour les trois moteurs 120
Figure 5.10	Évolution temporelle de la dilution moyenne pour les trois moteurs 121
Figure 5.11	Champs scalaire de vorticit� adimensionnelle dans le domaine de calcul entre 0,4 et 3,5 s : JT8D � gauche et LEAP1A � droite 122 (a) 0,4 s 122 (b) 0,4 s 122 (c) 0,7s 122 (d) 0,7s 122 (e) 2,5 s 122 (f) 2,5 s 122 (g) 3,5 s 122 (h) 3,5 s 122
Figure 5.12	�volution temporelle de la saturation moyenne des particules S_m 123
Figure 5.13	�volution temporelle du rayon moyen des particules r_m 124
Figure 5.14	Distribution des rayons de particules � diff�rents temps apr�s �jection pour les trois moteurs : la ligne pleine repr�sente le moteur LEAP1A, la ligne discontinue en gras repr�sente le moteur CFM56 et la ligne discontinue repr�sente le moteur JT8D 126
Figure 5.15	�volution temporelle de l'�paisseur otique τ 127
Figure 5.16	�volution temporelle de la masse moyenne des particules m_p 128
Figure 5.17	Champs scalaire de temp�rature dans le domaine de calcul pour les deux moteurs JT8D en haut et LEAP1A en bas avec particules de suies (point noir) et particules de glaces (point blanc) 129 (a) Plan X= 0 129

(b) Plan $X=0$	129
(c) Plan $X=0$	129
(d) Plan $Y=0$	129

LISTE DES EXTRAITS DE CODE

	Page
Extrait de code 1.1	Exemple d'une région parallèle dans OpenMP 28
Extrait de code 1.2	Parallélisation d'une boucle dans OpenMP 29
Extrait de code 1.3	Création d'une sections parallèle dans OpenMP..... 30
Extrait de code 2.1	Exemple d'une région parallèle dans FLUDILES 63
Extrait de code VI.1	Fonctions utilisées dans MPI 167

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

CFD	Computational Fluid Dynamics (simulation numériques des fluides)
DNS	Direct Numerical Simulation (simulation numérique directe)
LES	Large Eddy Simulation (simulation des grandes échelles)
RANS	Reynolds Average Navier-Stokes (équation moyennée de Reynolds)
LDA	Laser Doppler Anemometry (anémomètre Doppler à laser)
PIV	Particle image velocimetry (vélocimétrie par images de particules)
FLUIDILES	Fluide Direct Large Eddy Simulation
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
OpenMP	Open Multi-Processing
MPI	Message Passing Interface

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

Lettres Latines

A_p	Accélération d'un algorithme
bpr	Bypass ratio
C_d	Chaleur spécifique à pression constante de la phase dispersée [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
$C_{p,a}$	Chaleur spécifique à pression constante de l'air [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
$C_{p,g}$	Chaleur spécifique à pression constante du gaz [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
$C_{p,v}$	Chaleur spécifique à pression constante de la vapeur [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
C_s	Constante de Smagorinsky
$C_{v,a}$	Chaleur spécifique à volume constante de l'air [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
$C_{v,g}$	Chaleur spécifique à volume constante du gaz [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
D_v	Diffusivité thermique de la vapeur [$m^{-1}.s^{-1}$]
E_g	Énergie volumique du gaz [$J^{-1}.m^{-3}$]
E_k	Énergie cinétique turbulente adimensionnée
E_p	Efficacité d'un algorithme
f	Facteur de traînée
F	Poussée du moteur d'avion
$f_{3\alpha}, f_{3\beta}$	facteurs de correction cinétique
g	Accélération de la pesanteur [$m^{-1}.s^{-2}$]
h_a	Enthalpie massique de l'air [$J.kg^{-1}$]
h_v	Enthalpie massique de la vapeur [$J.kg^{-1}$]
J_v	Flux de diffusion de la vapeur dans l'air [$kg.m^{-2}.s^{-1}$]
k	Constante de Boltzmann [$J.K^{-1}$]
k_g	Conductivité thermique du gaz [$W.m^{-1}.K^{-1}$]

L	Chaleur latente massique de changement de phase [$J.kg^{-1}$]
L_0	Longueur de référence [m]
$L_{x,y,z}$	Longueur du domaine [m]
m	Masse des particules [kg]
m_0	Masse de référence des particules [kg]
\dot{m}	Variation de masse des particules [$kg.s^{-1}$]
$\dot{m}_{b,c,s}$	Débit massique [$m^3.s^{-1}$]
M_a	Masse molaire de l'air [$kg.mol^{-1}$]
M_v	Masse molaire de l'eau [$kg.mol^{-1}$]
N	Nombre de particules
n	Densité numérique de particules [$\#.m^{-3}$]
N_p	Nombre de particules physiques contenues dans une particule numérique
P_0	Pression de référence [Pa]
P_∞	Pression ambiante [Pa]
P_g	Pression du gaz [Pa]
P_v	Pression partielle de la vapeur [Pa]
P_{va}	Pression partielle de la vapeur ambiante [Pa]
P_{vj}	Pression partielle de la vapeur du jet [Pa]
p_r	Nombre de processeurs
Q_{ext}	Coefficient d'extinction de Mie
R	Constante molaire des gaz parfaits [$J.kg^{-1}.mol^{-1}$]
r_a	Constante molaire des gaz parfaits par unité de masse de l'air [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
r_g	Constante molaire des gaz parfaits par unité de masse du gaz [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
r_v	Constante molaire des gaz parfaits par unité de masse de la vapeur [$J.K^{-1}.kg^{-1}$]
r_0	Rayon de référence des particules [m]

r_p	Rayon des particules [m]
r_λ	Rayon de la couche limite des particules [m]
S	Rapport de saturation
t	Temps [s]
t_p	Temps d'exécution parallèle de l'algorithme [s]
t_{seq}	Temps d'exécution séquentiel de l'algorithme [s]
t_0	Temps de référence [s]
T	Température [K]
T_0	Température de référence [K]
T_∞	Température ambiante [K]
T_d	Température de la phase dispersée [K]
T_g	Température du gaz [K]
T_j	Température du jet [K]
T_p	Température des particules [K]
T_s	Température à la surface des particules [K]
u	Vitesse du gaz [$m.s^{-1}$]
U_j	Vitesse du jet [$m.s^{-1}$]
U_0	Vitesse de référence [$m.s^{-1}$]
V	Volume de contrôle [m^3]
u	Vitesse des particules [$m.s^{-1}$]
x_p	Position des particules [m]
X_v	Fraction molaire de la vapeur
$X_{(H_2O)_{v-\infty}}$	Fraction molaire de la vapeur ambiante
$X_{(H_2O)_{v-jet}}$	Fraction molaire du jet
Y_v	Fraction massique de la vapeur

Y_a	Fraction massique de la vapeur ambiante
Y_j	Fraction massique de la vapeur du jet
Z	Fraction massique de la vapeur normalisé

Lettres grecs

α	Coefficient d'accommodation
β	Coefficient de condensation
δ_{ij}	Symbole de Kronecker
Δ	Longueur de coupure du filtre [m]
$\Delta_{x,y,z}$	Pas d'espace dans les trois directions du maillage cartésien [m]
ϵ_{mol}	Énergie adimensionnée de dissipation moléculaire
ϵ_{sgs}	Énergie adimensionnée de dissipation de sous-maille
λ_w	Longueur d'onde correspondant à la lumière visible [μm]
μ_0	Viscosité dynamique de référence [PA.s]
μ_g	Viscosité dynamique du gaz [PA.s]
μ_r	Indice de réfraction du milieu
ν_{sm}	Viscosité cinématique de sous-maille [$m^2.s^{-1}$]
ρ_0	Masse volumique de référence [$kg.m^{-3}$]
ρ_{atmos}	Masse volumique atmosphérique [$kg.m^{-3}$]
ρ_d	Masse volumique de la phase dispersée [$kg.m^{-3}$]
ρ_g	Masse volumique du gaz [$kg.m^{-3}$]
ρ_j	Masse volumique du gaz initiale dans le jet [$kg.m^{-3}$]
ρ_p	Masse volumique des particules [$kg.m^{-3}$]
ρ_p	Masse volumique de la vapeur [$kg.m^{-3}$]
σ	Tension surfacique des particules [$J.m^{-2}$]
σ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses [$N.m^{-2}$]

τ_{ij}	Tenseur de sous-mailles [$N.m^{-2}$]
τ	Épaisseur optique
θ	Épaisseur de quantité de mouvement
Φ	Fonction scalaire quelconque
ω	Vorticité

Nombres sans dimension

C	Rapport des densités des phases dispersée et continue
M	Nombre de Mach
Nu	Nombre de Nusselt
Pr	Nombre de Prandtl
Re	Nombre de Reynolds
Z_0	Différence entre la fraction massique de vapeur du jet et ambiante
γ	Rapport des chaleurs spécifiques
Π	Paramètre de couplage

INTRODUCTION

Bien que la pandémie du COVID-19 ait eu un impact indéniable sur la croissance du transport aérien, du moins sur le court terme, l'impact des gaz à effet de serre de l'aviation reste une préoccupation environnementale. Selon l'Organisation de l'Aviation Civile internationale (OACI 2019), un des impacts de l'aviation est causé par les effets indirects des émissions de H₂O-vapeur (29% des émissions totales des moteurs). Dans des conditions de saturation, la vapeur d'eau se condense sur des particules de suie émises par le moteur d'avion, ces dernières sont appelées noyaux de condensation (Heymsfield & Westbrook (2010), Heymsfield, Baumgardner, DeMott, Forster, Gierens & Kärcher (2010)), formant par la suite des particules de glace qui croissent en absorbant de la matière condensable. Ces dernières forment les traînées de condensation derrière les moteurs d'avion (figure 0.1), appelées ci-après contrail (Appleman (1953), Heymsfield *et al.* (2010)). Les traînées de condensation persistantes conduisent ensuite à la formation de cirrus couvrant une vaste zone horizontale pouvant aller jusqu'à 50000 km pendant des dizaines d'heures (Minnis & Smith Jr (1998)). En réfléchissant les radiations entrantes et sortantes, les nuages produits par les avions (AIC) entraînent un réchauffement climatique (Lee et al., 2010). Les évaluations mondiales estiment que l'impact de l'AIC est trois fois plus important que celui du CO₂ de l'aviation (Solomon (2007), Karcher et al. (2018)). De plus, toutes les données obtenues expérimentalement indiquent que le nombre de cristaux de glace est directement régi par les conditions en sortie du moteur, i.e champ proche derrière l'avion, et reste relativement constant pendant la durée de vie des traînées de condensation (Schumann & Heymsfield (2017)). Dans ce contexte, la formation des traînées de condensation dès la sortie du moteur ont suscité un intérêt croissant pour, d'une part, caractériser le processus de formation des traînées et, d'autre part, étudier des stratégies de mitigations. Par conséquent, une meilleure caractérisation des particules de glace en sortie de la buse est un enjeu clé dans la conception de moteurs d'avion, minimisant ainsi leur impact environnemental à long terme.



FIGURE 0.1 Image d'une traînée de condensation derrière un avion

Les processus menant à la formation des traînées de condensation ont fait l'objet de nombreuses études expérimentales et numériques. Expérimentalement, la formation et l'évolution des traînées de condensation ont été étudiées via de nombreux programmes en Europe et aux États-Unis. Des mesures expérimentales ont été réalisées pour caractériser les principales propriétés des traînées de condensation et les paramètres affectant leur formation et leur dispersion dans l'atmosphère. À titre d'exemple, Schumann et al. (2000) ont rapporté des observations de traînées de condensation derrière deux types d'avion équipé de turbosoufflantes, un moderne et un plus ancien, et ont confirmé la théorie prédisant que les moteurs d'avion moderne, avec un taux de dilution plus élevée, forment des traînées sur une plus grande plage d'altitude de croisière.

En raison du coût excessif des campagnes en vol et des progrès continus des ressources de calcul informatique, les modèles numériques ont suscité davantage d'intérêt pour mieux comprendre les facteurs permettant la formation des traînées de condensation. Ainsi, les processus impliqués dans la formation des traînées de condensation peuvent être classés en différentes catégories : dynamiques (effets de mélange, interactions de vortex de jet, interaction de sillage d'aéronef),

thermodynamiques (condensation et évaporation), microphysiques (nucléation, croissance des particules) et processus chimiques (transformations atmosphériques). Ces phénomènes couplés remettent en question les capacités actuelles des outils de modélisation existants. Ainsi, dans la littérature plusieurs approches de modélisation des traînées de condensation ont été étudiées avec différents niveaux de représentations physiques, des plus petites échelles microphysique au plus grandes échelles de l'atmosphère. Malgré ces avancées, d'importantes incertitudes persistent sur les propriétés des traînées de condensation telles que la densité des cristaux de glace, la distribution en tailles, le diamètre effectif dans le champ proche du moteur. Les chercheurs manquent particulièrement de données quantitatives sur les propriétés microphysiques et thermodynamiques initiales des traînées de condensation desquelles dépendent considérablement leurs évolutions dans le sillage de l'avion. Devant la difficulté d'accéder à des données fiables dans le champ proche de l'avion, la simulation numérique reste l'outil principal d'analyse des caractéristiques de la formation des traînées de condensation.

Dans cette perspective, la plus grande partie du travail consistera à prédire et évaluer les tailles et le nombre de particules des glaces lors de la formation des traînées de condensation, cela dans le but de mieux évaluer leur impact radiatif et ainsi de trouver des solutions de mitigation. Cette thèse se positionne alors dans le cadre de l'étude des premiers instants de la vie du panache, correspondant à la phase de formation des traînées de condensation. L'objectif principal de la thèse est d'approfondir la compréhension de la formation et de la croissance des particules de glace en utilisant et modifiant un code de CFD de haute précision avec un modèle microphysique intégré afin de pouvoir modéliser la formation d'une traînée de condensation en altitude de vol. Cet outil d'investigation permettra aux motoristes aéronautiques de déterminer l'impact des paramètres du jet en sortie de moteur sur la formation des cristaux de glace.

Dans un premier temps, une revue de la littérature mettra en évidence les travaux accomplis jusqu'à présent pour la dynamique du jet et l'approche faite pour la formation des traînées de

condensation. Une attention particulière est portée à la modélisation des premiers instants de vie des traînées de condensation. Cette revue de littérature permettra de formuler les objectifs secondaires de la thèse. Dans le second chapitre, la modélisation des processus dynamiques du jet propulsif et l'intégration des modèles microphysiques dans l'outil numérique de la mécanique des fluides FLUIDILES seront présentées. Une brève présentation de la méthode des différences finies ainsi que les méthodes de résolution de la turbulence est menée. Par la suite, l'accent est mis sur les méthodes utilisées pour paralléliser l'outil numérique de la mécanique des fluides FLUIDILES. Le troisième chapitre est consacré à la validation de la partie du jet qui sera utilisé pour simuler la partie dynamique des premiers instants de vie des traînées de condensation. En particulier, ce chapitre se focalise sur la capacité de l'outil numérique de la mécanique des fluides FLUIDILES à modéliser un jet turbulent. Cette application est simulée et les résultats sont comparés à la fois avec des résultats expérimentaux et numériques. Le quatrième chapitre est consacré à une simulation complète de la formation de la traînée de condensation en sortie de moteur, en activant le modèle microphysique présenté au Chapitre 2. Enfin, les résultats d'études de sensibilité afin d'évaluer l'impact des différents paramètres du moteur seront montrés dans le cinquième chapitre. L'influence de certains paramètres tels que le flux secondaire ou le taux de dilution sur les caractéristiques microphysiques de la traînée, comme la taille des particules de suie émises par les moteurs y est discutée. Pour finir, une synthèse globale résume les principaux résultats de la thèse. Dans un souci de continuité, des recommandations sont proposées en guise de pistes de recherches futures à la fin de la thèse.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE, PROBLÉMATIQUE ET OBJECTIFS

1.1 L'impact de l'aviation sur le réchauffement climatique

Le groupe environnemental IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) met à disposition les estimations des forçages radiatifs des facteurs influençant le bilan radiatif de la terre. Le forçage radiatif mesure le bilan net d'énergie faisant suite à une perturbation de l'équilibre énergétique de la Terre. Avec les connaissances actuelles, les études ont montré que l'importance globale des émissions dues au trafic aérien devrait rester très inférieure à celles dues aux activités anthropiques. Il représente ici au plus 5% du forçage radiatif global (Boucher & Haywood (2001)) et sa contribution ne constitue pas un élément majeur du réchauffement climatique. Mais, les prévisions les plus récentes du trafic aérien mondial montrent une augmentation de 4 à 5 % d'ici à l'aube 2030, malgré la pandémie de COVID-19, qui ne devrait avoir un impact que sur le court terme. Ce qui fait de l'impact environnemental de l'aviation civile un sujet de plus en plus préoccupant et important. Le forçage radiatif de l'aviation est estimé à $100,9 \text{ mW.m}^{-2}$. D'après IPCC (Lee et al. (2021)), les cirrus induits par les traînées de condensation dans les régions humides sont les principaux contributeurs au forçage radiatif de l'aviation, leur contribution est estimée à $57,4 \text{ mW.m}^{-2}$. Ensuite, suit le dioxyde de carbone qui est évalué à environ de $34,3 \text{ mW.m}^{-2}$, suivit de l'émission d'oxydes d'azote ($17,5 \text{ mW.m}^{-2}$), de l'émission de vapeur d'eau ($2,0 \text{ mW.m}^{-2}$), pour finir l'émission d'aérosols ($0,94 \text{ mW.m}^{-2}$). De tous ces composants, le forçage radiatif des cirrus induits représente la contribution majeure du forçage radiatif de l'aviation. Cela est dû au fait que, les effluents sont émis dans la haute troposphère et la basse stratosphère ; à cette altitude, ils peuvent modifier les processus atmosphériques naturels. Par contre, les estimations du forçage radiatif des cirrus induits présentent de fortes incertitudes. L'état des connaissances actuel ne permet pas encore de faire la distinction entre les cirrus naturels et les cirrus induits par les traînées de condensation, ce qui complique l'évaluation de leur impact. De même, l'estimation de l'épaisseur optique des traînées de condensation présente également de fortes incertitudes. Cela est dû aux manques de connaissance des propriétés

microphysique des cristaux de glace composant les traînées de condensation ou le cirrus. Ainsi, étudier les processus physiques menant à la formation des traînées de condensation vise, dans un premier temps, à apporter les propriétés microphysique des traînées de condensation nécessaire aux calculs du forçage radiatif, puis à donner des moyens des stratégies de mitigation de l'impact environnemental des traînées de condensation.

1.2 Les traînées de condensation

Les traînées de condensation se créent à la suite du passage d'un avion entre la haute troposphère et la basse stratosphère. Ce dernier émet majoritairement des particules de suie mais aussi des espèces chimiques qui constituent les noyaux de condensation des traînées de condensation (Kärcher et al. (1996)). La formation des traînées de condensation est composée d'une partie aérodynamique, de processus chimiques (transformations atmosphériques), d'une partie microphysique et d'une partie thermodynamique (condensation et évaporation).

Le phénomène de formation des traînées de condensation a été premièrement étudié par l'approche théorique, notamment par Schmidt-Appleman (Schmidt (1941), Appleman (1953)). Ces derniers proposent une approche thermodynamique pour la formation des traînées de condensation. La théorie de Schmidt et Appleman repose sur la variation de l'humidité relative dans le panache créé par l'avion. Dans cette théorie, les traînées de condensation se forment si la saturation (rapport entre la pression de vapeur régnant dans le milieu et la pression de vapeur saturante, $S = \frac{P}{P_{sat}}$) du mélange atteint celle de la condensation de la vapeur. Cette théorie nécessite la connaissance des température, pression et humidité relative en sortie de moteur et dans l'air ambiant. La relation thermodynamique associée à la formation des traînées est décrite sur la figure 1.1. La ligne rouge représente l'évolution de la pression partielle de vapeur et de la température du panache et la ligne bleue celle de la vapeur saturante. La ligne AB représente la ligne de mélange ("mixing line" en anglais) du fait que le point A représente les conditions chaudes et humides de sortie de moteur, le point B représente les conditions atmosphériques. Cette ligne représente alors la façon dont le mélange tend vers les conditions atmosphériques. Le critère de Schmidt-Appleman estime donc que si la ligne de mélange coupe la ligne de saturation

une trainée de condensation se forme (figure 1.1a). Si cette dernière ne coupe pas la ligne de saturation, aucune trainée de condensation n'est formée (figure 1.1b).

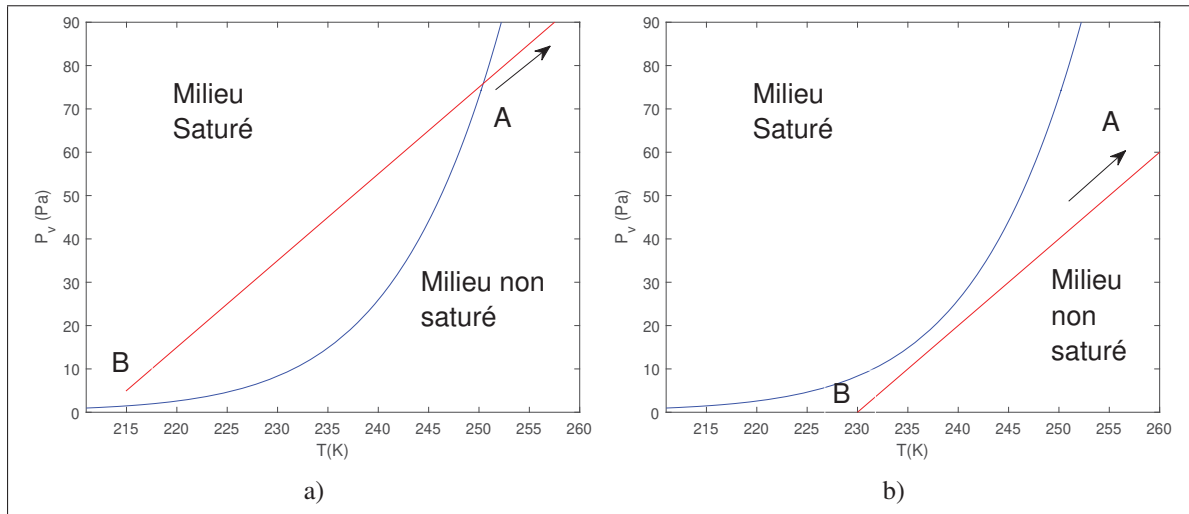


FIGURE 1.1 Représentation du critère de Schmidt-Appleman avec le diagramme $P_v(T)$: (a) Formation de trainées de condensation, (b) Non formation de trainées de condensation

Ce critère a été ensuite révisé par Schumann (1996) afin de prendre en compte de nouvelles considérations qui jouent un rôle important dans la formation de la trainée, notamment le rendement des moteurs de l'avion. Le rendement est défini comme le rapport entre le travail fourni par l'avion et l'énergie thermique émise par le carburant :

$$\eta = \frac{FU_{\infty}}{\dot{m}_f Q} \quad (1.1)$$

où F représente la poussée de l'avion, U_{∞} la vitesse de l'air, Q la chaleur spécifique et \dot{m}_f le débit massique du carburant. Le rendement global est généralement plus élevé pour les avions modernes par rapport aux anciens.

La poussée spécifique est définie par Farokhi (2014) comme le rapport entre la poussée du moteur d'avion F et le débit massique de l'air passant dans le moteur. Pour un moteur monoflux, elle est définie comme :

$$\frac{F}{\dot{m}_s} = (U_s - U_\infty) \quad (1.2)$$

où \dot{m}_s représente le débit massique de l'air passant dans le moteur, U_∞ la vitesse de l'air ambiant et U_s la vitesse du jet en sortie de moteur.

Pour un moteur à double flux, la poussée spécifique est définie par Farokhi (2014) comme suit :

$$\frac{F}{\dot{m}_c + \dot{m}_b} = \frac{U_c + bpr \cdot U_b}{1 + bpr} - U_\infty \quad (1.3)$$

où U_c est la vitesse du jet dans le flux primaire, U_b la vitesse du jet dans le flux secondaire et bpr le taux de dilution.

Le taux de dilution (bpr) entre le flux primaire et secondaire est défini comme le rapport entre le débit massique de l'air dans la partie du flux secondaire et le débit massique de l'air dans la partie du flux primaire.

$$bpr = \frac{\dot{m}_b}{\dot{m}_c} \quad (1.4)$$

où \dot{m}_b est le débit massique de l'air dans le flux secondaire et \dot{m}_c est le débit massique de l'air dans le flux primaire.

L'effet du rendement sur la formation des traînées de condensation, appelé "η-effect", a été étudié par Schumann (2000b). Ses observations se sont portées sur un moteur à faible taux de dilution ($bpr \approx 1,2-2$) et un moteur à haut taux de dilution ($bpr \approx 6,8$). Les analyses obtenues ont confirmés les conclusions théorique du critère de Schmidt-Appleman révisé, à savoir qu'un moteur ayant un taux de dilution élevé, c'est-à-dire un rendement élevé, conduit à la formation de traînées de condensation plus visible tandis que celui avec un taux de dilution plus faible, i.e

rendement plus faible, produit une traînée de condensation moins visible ou pas de traînée de condensation dans des conditions similaires.

Par ailleurs, les observations de Schumann (1996) et les travaux de Gerz et al. (1998), Garnier et al. (1997a) et de Miake-Lye et al. (1993) ont permis de distinguer l'évolution de la dynamique d'une traînée de condensation. L'évolution de la dynamique d'une traînée de condensation peut se décomposer schématiquement en quatre régimes successifs correspondant chronologiquement au régime jet, au régime tourbillonnaire, au régime de dispersion et au régime de diffusion (figure 1.2). Chacun de ces régimes est important dans la formation des traînée de condensation et leurs spécificités sont décrites ci-dessous.

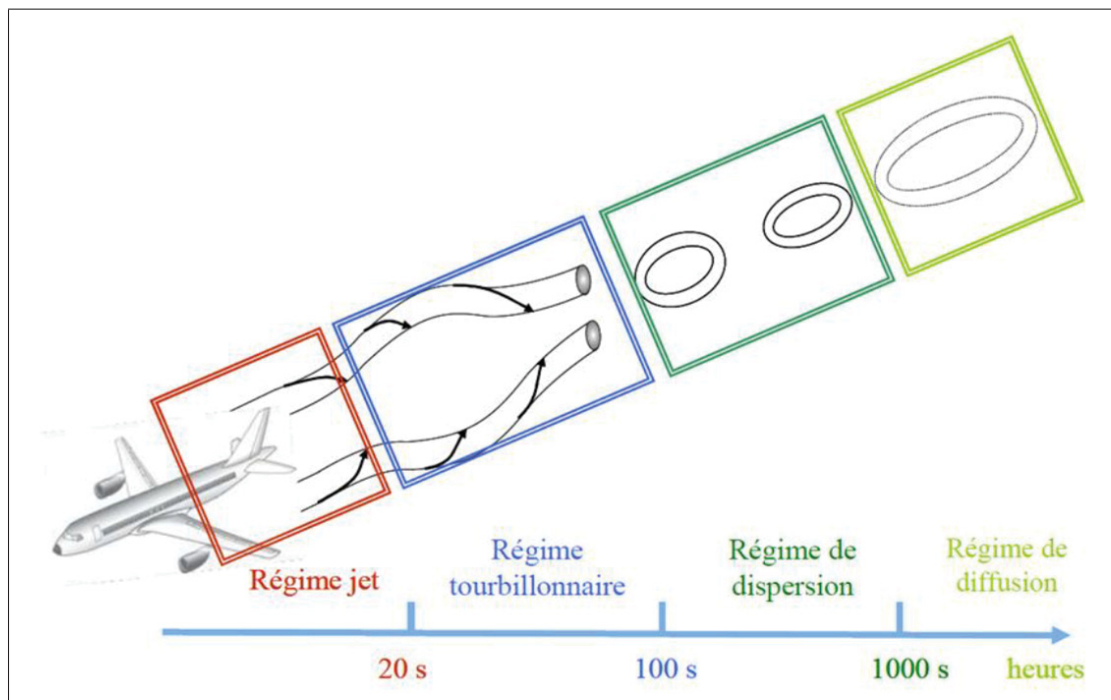


FIGURE 1.2 Évolution dynamique d'une traînée de condensation (source : Guignery (2010b))

- Le régime jet

Le régime jet correspond aux premiers instants après l'éjection des effluents de la tuyère du moteur. Ce régime peut être assimilé à la dynamique d'un jet turbulent dans l'air ambiant

(Hoshizaki (1972)). L'écoulement de jet en sortie de moteur est caractérisé par l'éjection des produits de la combustion. Le jet en sortie de moteur est unidirectionnel et de sens opposé à celui de l'avion. Les gaz émis par le moteur sont initialement chauds, puis se refroidissent très rapidement, en se mélangeant à l'atmosphère.

Par contre, peu d'études expérimentales du régime jet en conditions réelles de vol ont été menées, du fait des conditions extrêmes qui rendent les expériences difficiles à mettre en œuvre. Cependant, des études sur maquette et en soufflerie ont pu être faites. Garnier, et al. (1999) et Wang et al. (2000) ont mis en évidence que les jets deviennent asymétriques sous l'effet des tourbillons de sillage.

- Le régime tourbillonnaire

La deuxième phase de la formation d'une traînée de condensation est la phase tourbillonnaire. Cette phase se forme par l'entraînement du jet en sortie du moteur par le tourbillon de sillage. Ces tourbillons sont causés par la différence de pression entre l'intrados et l'extrados à chaque extrémité des ailes de l'avion. La nappe cisailée, échappée du bord de fuite de l'aile, s'enroule ensuite autour de chaque tourbillon. Les tourbillons de sillages sont caractérisés par un écoulement purement tangentiel et bidimensionnel. Ce régime se distingue par le contrôle des processus de dispersion des particules par la dynamique tourbillonnaire (Hoshizaki (1972)). De plus, Gerz & Ehret (1997) montrent que dans cette phase les effluents piégés à l'intérieur des tourbillons se déplacent vers le bas. Un autre tourbillon secondaire est formé lors de ce processus dû au fait qu'une partie des effluents est libérée de l'attraction du sillage, mais ce dernier se diffuse très rapidement dans l'atmosphère ambiante (Paugam, Paoli & Cariolle (2010)).

- Le régime de dispersion

Le régime de dispersion, ou régime de destruction, correspond à la troisième phase de la formation d'une traînée de condensation. Dans cette phase, les tourbillons contrarotatifs interagissent mutuellement et créent une instabilité de grande longueur d'onde appelée instabilité de Crow (CROW (1970)). Cette instabilité est représentée sur la figure 1.3. Cette phase est aussi marquée par le début de la destruction des tourbillons de sillage par les turbulences d'origine atmosphérique (Lewellen & Lewellen (2001)). Par la suite, les structures



FIGURE 1.3 Instabilité de Crow (source : Brian Barrett)

tourbillonnaires continuent leur descente en diffusant les effluents qu'ils renferment. Ce dernier processus emmène à la naissance d'une suite périodique de bouffées de panache appelées "Puffs". Ce processus est représenté sur la figure 1.4. La fin du régime de dispersion est marquée par la destruction totale des tourbillons de sillage.

- Le régime de diffusion

Le dernier régime de la formation d'une traînée de condensation est appelé régime de diffusion. Cette phase est marquée par le fait que la dynamique du panache est soumise à la dynamique de l'atmosphère. La turbulence atmosphérique, la stratification et le cisaillement du vent diffusent le panache formant la traînée de condensation et ce dernier descend sous l'effet de la sédimentation (Gierens & Jensen (1998)). À la fin du processus, le panache se transforme finalement en cirrus (Minnis et al. (1998); Schröder & others. (2000)).

Pour conclure, la formation et l'évolution d'une traînée de condensation derrière un avion dans l'atmosphère sont des processus complexes et peuvent être représentées schématiquement par quatre régimes principaux, chacun étant caractérisé par un phénomène lié à la dynamique de



FIGURE 1.4 Formation de " Puffs" dans une trainées de condensation (source : Brian Barrett)

l'écoulement. Mais de ces quatre interactions, le régime du jet en sortie de moteur joue un rôle prépondérant. Ce dernier a un impact important sur le mélange et la dispersion initiale des effluents dans l'atmosphère. Et toutes les données obtenues expérimentalement indiquent que le nombre de cristaux de glace est directement régi par les conditions en sortie du moteur, i.e champs proches, et reste relativement constant pendant la durée de vie des traînées de condensation (Schumann & Heymsfield (2017)).

1.3 Enjeux de l'étude du jet en sortie du moteur

Dans le cadre de la formation des traînées de condensation, l'étude du régime jet est important du fait que ce dernier a impact sur la formation des cristaux de glace et ainsi sur la formation des traînées de condensation. En effet, des études telles que celles de Guignery (2010b), Lewellen & Lewellen (2001) et Wong et al. (2008) ont montré que l'écoulement du jet a un impact majeur sur la dynamique de la formation des traînées de condensation. Lewellen & Lewellen (2001) établissent que la dynamique de jet en sortie de moteur a un effet durable sur la formation des traînées de condensation. Par ailleurs, le critère thermodynamique de Schmidt-Appleman indique que la formation des traînées de condensation est due au mélange du jet en sortie de moteur avec l'atmosphère ambiante. Ce processus conduit alors à un mélange atteignant la saturation

en eau et permet la formation de cristaux de glace, menant ainsi la formation des traînées de condensation. De même, Kärcher (1994) indique que tous les processus microphysiques qui initient la formation de traînées commencent au début de la phase d'expansion du jet. Cette étude montre aussi que les traînées de condensation se forment initialement dans les premiers mètres de la zone de mélange turbulent du jet et que cette zone de mélange a un effet significatif sur les distributions radiales de divers effluents en sortie de moteur. Ainsi, comprendre les mécanismes qui conduisent à l'expansion du jet afin d'isoler ceux qui ont un impact important dans la formation de la traînée de condensation est nécessaire.

Par conséquent, l'étude du jet en sortie de moteur est une étape importante dans la compréhension de la formation de la traînée de condensation. Ici, notre étude consiste à analyser les paramètres menant à la formation des cristaux de glaces dans le jet turbulent en sortie de moteur et ainsi à la formation des traînées de condensation. De ce fait, la caractérisation ainsi que les études numériques du jet turbulent seront présentées en détail dans les sections suivantes.

1.4 Le jet propulsif

1.4.1 Caractérisation

Il est question ici d'un jet se propageant dans une atmosphère statique, il entraînera cette atmosphère et se répandra dans la direction radiale et axiale jusqu'à ce que les actions de la viscosité dissipent son énergie et entraîne sa dispersion. En sortie de tuyère, la vitesse et la température des gaz, pour un avion de transport civil, est de l'ordre de $V_j = 480 m.s^{-1}$ et $T_j = 580 K$.

Différentes régions axiales définissent le jet turbulent (Figure 1.5) : le cône potentiel, la zone de transition et la zone d'auto similarité. Le cône potentiel se situe dans la couche de cisaillement. Dans ce dernier, la vitesse axiale reste inchangée $U_c = U_0$. Cette région est aussi la région de l'établissement de l'écoulement. Il se situe habituellement entre $0 \leq x/D \leq 7$ (Ball, Fellouah & Pollard, 2012). La zone de transition est caractérisée par le fait que la vitesse axiale

décroit en fonction de x . C'est dans cette région de l'écoulement que les structures turbulentes fortement anisotropes, qui se forment dans les premiers diamètres de la buse, évoluent et interagissent. Il est à noter que cette région est très dépendante du nombre de Reynolds. La zone d'auto similarité, situé à $x/D \geq 70$ (Ball *et al.* (2012)), est la région où l'écoulement est pleinement développé ou auto similaire. L'écoulement ne dépend plus des conditions d'entrée du jet.

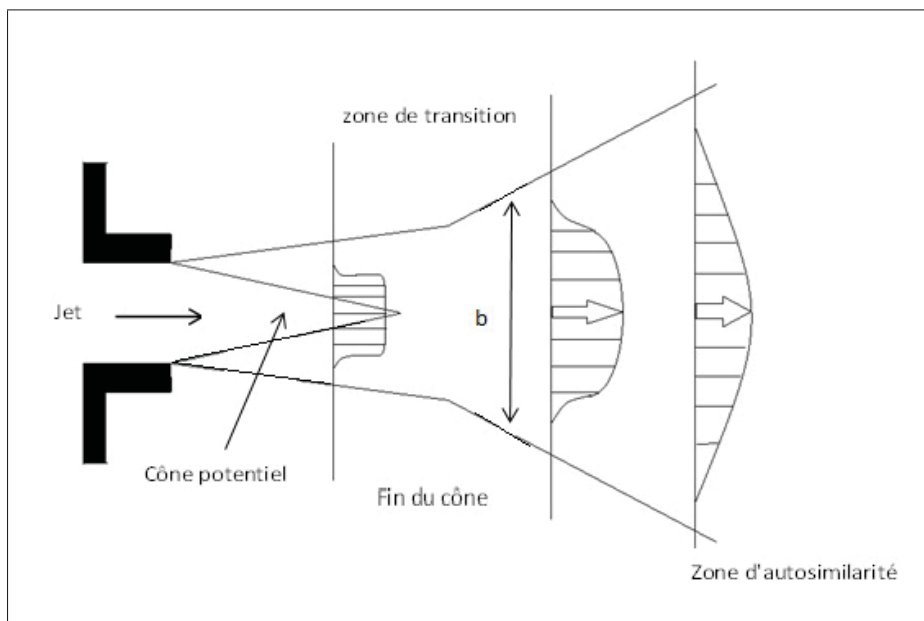


FIGURE 1.5 Schéma du jet rond, reproduit de White & Corfield (1991)

La turbulence dans le jet est due à l'amplification de petites perturbations qui se développent à la périphérie du jet tel que les structures macroscopiques cohérentes et de plus petites structures incohérentes. La formation de la turbulence a la même caractéristique pour tous les jets dès que l'on considère un nombre de Reynolds élevé (Mattingly & Chang (1974)). Cette transition vers la turbulence pleinement développée provient de deux instabilités : l'instabilité primaire, où l'instabilité de Kelvin-Helmholtz, et l'instabilité secondaire où instabilités azimutales des anneaux tourbillonnaires. L'instabilité de Kelvin-Helmholtz est produite par la différence de vitesse dans la couche cisailée qui engendre l'apparition d'anneaux tourbillonnaires. Entre autre,

les instabilités azimutales sont formées par l'apparition de paires de tourbillons longitudinaux contrarotatifs.

Par ailleurs, les études expérimentales et théoriques du jet rond turbulent (Pai (1954), Abramovich (1963), White & Corfield (1991) et Hussein *et al.* (1994)) ont montrées que :

- La vitesse moyenne transversale reste moins élevée que la vitesse longitudinale.
- Les épaisseurs de la zone de mélange initiale et de la zone développée varient linéairement dans le sens longitudinal.
- Les profils de vitesse et de température dans le cône potentiel sont similaires et ont une forme proche d'une tangente hyperbolique.
- Les profils de vitesse et de température dans la zone d'auto similarité sont similaires et ont une forme de type gaussien.

1.4.2 La simulation numérique du jet turbulent

La simulation des écoulements turbulents repose sur la résolution numérique des équations de Navier-Stokes, ces dernières regroupant la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, et de l'équation de conservation de l'énergie. Trois approches peuvent être utilisées pour les simulations d'écoulement turbulent : la simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation, DNS), la simulation des grandes échelles (Large Eddy Simulation, LES) et les écoulements moyennés de Reynolds (Reynolds Average Navier-Stokes, RANS). La DNS résout explicitement toutes les échelles spatio-temporelles de l'écoulement turbulent et le maillage utilisé pour le calcul doit être en mesure de couvrir cette large gamme d'échelle. Par exemple, Wang et al. (2010) a modélisé numériquement un jet rond turbulent subsonique en DNS. Les conditions de non-réflexions de Thompson ont été prises en compte pour les conditions aux limites (Thompson (1987), Thompson (1990)). Ils ont comparé leurs résultats DNS avec les résultats de Wygnanski & Fiedler (1969) et Hussein *et al.* (1994). Leurs résultats concordent bien avec les données expérimentales à la fois pour la vitesse moyenne, les tenseurs de Reynolds et les moments d'ordre 3 pour la vitesse. Ils ont établi aussi que le jet était auto similaire à

partir d'une distance le 19 fois le diamètre d'éjection. D'autre part, Babu & Mahesh (2004) ont étudié l'effet de l'entraînement près de la buse d'entrée pour un jet rond turbulent en DNS. Il a été montré que l'entraînement près de la buse produit un écoulement secondaire qui augmente considérablement le débit volumique près de la sortie du jet. Le cône potentiel est plus petit en présence de l'entraînement. En conséquence, l'intensité turbulente et les fluctuations de pression sur l'axe du jet sont sensiblement affectées. La simulation numérique directe est plus utilisée pour les bas nombres de Reynolds dans laquelle la gamme d'échelles pour être résolu est plus petite, mais il est pratiquement impossible à utiliser pour les applications industrielles ou pour le jet turbulent en sortie de moteur, car elle mettrait en jeu un nombre de points de maillage trop important pour la capacité des supercalculateurs actuels. Or, la plupart des applications industrielles mettent en jeu des nombres de Reynolds très élevés (de l'ordre de 10^6). Une autre approche est la méthode RANS. La solution consiste à appliquer un opérateur de moyenne aux équations, le plus classique étant celui de la moyenne temporelle. Cependant, elle ne donne accès qu'aux champs moyens. Une approche intermédiaire entre la DNS et le RANS est plus connue sous le nom de simulation des grandes échelles (Large Eddy Simulation, LES). En LES, les grandes échelles de l'écoulement (basse fréquence) sont résolues, alors que l'effet des petites échelles (hautes fréquences) est modélisé. La Simulation des grandes échelles, ayant un coût de calcul plus faible que la DNS, est une alternative intéressante au RANS. La LES a été développée et a été étudiée comme un outil de prédiction de l'écoulement turbulent pour l'ingénierie pendant les trois dernières décennies.

En raison des coûts de calcul, les premières simulations LES d'un jet turbulent ont été faites en temporelle. Pour la simulation temporelle, le calcul est réalisé dans un repère se déplaçant à une vitesse donnée et l'écoulement est supposé périodique dans une direction (Poinso & Lelef, 1992). De plus en simulation temporelle, l'écoulement est calculé dans un référentiel mobile ayant la vitesse moyenne de l'écoulement. Ainsi, le jet obtenu ne représente pas en tout point un jet spatial, mais l'évolution temporelle du jet peut présenter qualitativement les mêmes phénomènes physiques qu'une simulation spatiale et nécessite moins de points de maillage (Gago, Garnier & Utheza, 2003). En effet, Brancher (1996) a montré que l'instabilité primaire

qui se développe dans le jet (l'instabilité de Kelvin Helmholtz) est de nature convective et peut être modélisée à l'aide d'une approche temporelle. Dans ce cadre, on peut citer Verzicco & Orlandi (1994) qui ont modélisé numériquement un jet temporel rond à faible nombre de Reynolds. Les simulations montrent la formation de structures longitudinales, et leur rôle dans la propagation du jet. D'autre part, Gago *et al.* (2003) ont étudié un jet rond non isotherme évoluant temporellement à faible nombre de Mach. Les résultats obtenus en LES sont comparés à ceux obtenus en DNS. Les résultats obtenus ont permis de montrer la capacité de la simulation des grandes échelles à modéliser un jet rond turbulent pour certains modèles de sous-maillages. Néanmoins, cette stratégie de calcul ne permet pas de correctement simuler la phase du régime de jet et de bien décrire son développement. En effet, des conditions limites de périodicité sont imposées dans la direction axiale du jet. Les gradients axiaux de l'écoulement s'en trouvent négligés. De ce fait, les simulations temporelles ne représentent pas physiquement l'écoulement d'un jet (Zhang, Rong, Wang & Wang, 2011). Toutefois, toutes ces études ont permis d'obtenir les premiers résultats sur la dynamique du jet turbulent. De même, l'approche temporelle permet également de faire plusieurs études paramétriques sur des temps de calcul plus courts.

Plus récemment, la croissante accessibilité à des puissances de calcul plus importantes qui permettent d'agrandir le domaine de calcul, ainsi que le besoin de comprendre les phénomènes locaux dans un jet d'air turbulent, a conduit à une transition vers la simulation spatiale. Cette dernière permet de connaître l'état d'un écoulement à chaque position en espace. Dans le cadre de la simulation des grandes échelles du jet turbulent, cela a permis d'obtenir des écoulements qualitativement plus proches de ceux obtenus expérimentalement.

L'étude d'écoulement de jet turbulent en LES, avec une approche spatiale, s'inscrit dans plusieurs domaines de l'aérospatiale. Ainsi plusieurs travaux sur différentes thématiques ont émergé. Bogey & Bailly (2006a) ont étudié l'effet du nombre de Reynolds sur le développement de l'écoulement et sur l'énergie de dissipation. Pour cela, ils ont simulé un jet rond transitoire en LES avec un filtre sélectif à haut nombre de Mach (0,9). Ils montrent que plus le nombre de Reynolds décroît, plus le jet se développe lentement en amont du noyau potentiel. L'effet du nombre de Reynolds se retrouve aussi sur le mécanisme de dissipation d'énergie. L'impact de

la masse volumique, quant à lui, a été étudié par Foysi et al. (2010). L'étude consiste ici à une simulation des grandes échelles d'un jet chaud turbulent à masse volumique variable. Leurs résultats montrent que le taux de décroissance de la vitesse centrale est fortement affecté par la température du jet. La simulation des grandes échelles est aussi utilisée en aéroacoustique. Par exemple, Bogey et al. (2003) ont examiné le bruit émis par un jet rond subsonique avec un nombre de Mach de 0,9 et un nombre de Reynolds de 65000 en LES. Ils ont établi que la simulation des grandes échelles (LES) était capable de prédire l'écoulement ainsi que le son émit par le jet. Zhang *et al.* (2011) ont mis en place une simulation des grandes échelles d'un jet rond turbulent en coordonnées cylindriques avec une forte instabilité en condition d'entrée. L'évolution spatiale des structures cohérentes présentes dans l'écoulement y est présentée.

Les simulations numériques qui ont été décrites ci-dessus utilisent donc la simulation des grandes échelles pour modéliser la partie dynamique de la formation d'un jet turbulent. Ainsi, dans cette thèse, pour modéliser numériquement la partie dynamique des traînées de condensation en champs proches, i.e le jet turbulent, la simulation des grandes échelles est utilisée. Cette approche permettra de modéliser les structures turbulentes présentes dans le jet, ces dernières ayant un impact sur la formation des cristaux de glaces.

1.5 Processus microphysique dans les contrails

Ce paragraphe décrit les mécanismes de formation des cristaux de glaces ainsi que les différents aspects de la simulation numérique de la formation des traînées de condensation.

1.5.1 Formation des cristaux de glace

1.5.1.1 Processus de formation des particules de glace

Les gaz émis par les moteurs aéronautiques sont constitués des produits de combustion. Ces derniers subissent dans l'atmosphère des transformations et de réactions chimiques qui vont amener à la création de nouvelles particules et favoriser la croissance des particules existantes.

Ces transformations sont communément appelées processus microphysiques. Ces derniers désignent les phénomènes intervenant à une échelle microscopique conduisant à la formation et à la croissance de cristaux de glace dans le sillage de l'avion. L'un des processus microphysique fondamentaux qui intervient dans la création de nouvelles particules est la nucléation. Deux types de nucléation sont à distinguer lors de la formation de cristaux de glace : la nucléation homogène et la nucléation hétérogène.

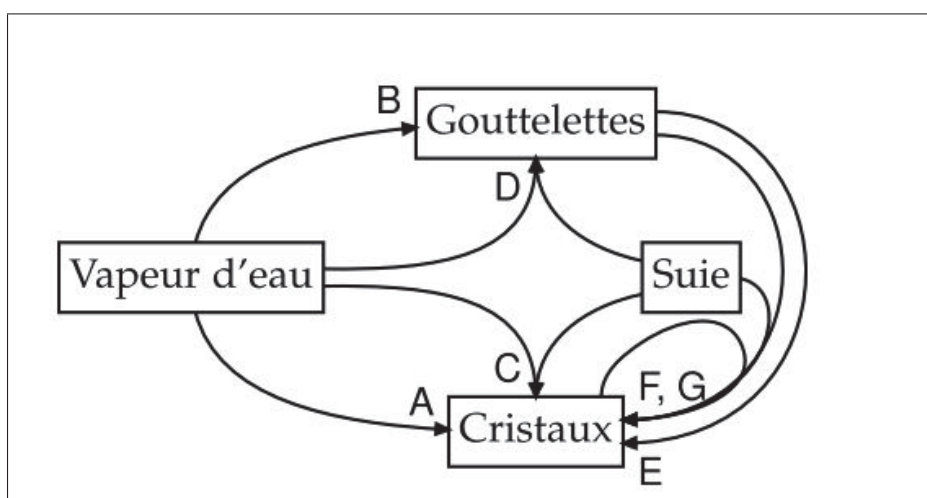


FIGURE 1.6 Nucléation de la vapeur d'eau en gouttelettes et en cristaux : A dépôt homogène, B liquéfaction homogène, C dépôt hétérogène, D liquéfaction hétérogène, E solidification, F contact et G immersion. selon Picot (2013)







La figure 1.6 montre le cycle de la nucléation de la vapeur d'eau et de la formation des cristaux de glace et se regroupent en deux catégories :

- La nucléation homogène : elle se produit en l'absence d'éléments étrangers à la phase mère, c'est-à-dire en l'absence de noyau de condensation (phase A et B de la figure 1.6). De ce fait, en l'absence de support, le système est ainsi dans l'obligation de fournir une énergie élevée pour favoriser la création d'une interface entre la phase mère et la nouvelle phase, étape primordiale à la création d'une particule. Son énergie libre doit ainsi être extrêmement élevée.

- la nucléation hétérogène : elle se fait grâce à des particules préexistantes, qui agissent comme des noyaux de condensation (phase C et D de la figure 1.6). La présence de telles surfaces permet d'abaisser la quantité d'énergie nécessaire à la formation d'une particule (Delmas, Mégie & Peuch (2005)). Ainsi, en présence de particules solides en sortie de moteur, pouvant constituer des noyaux de condensation, la formation de glace par nucléation hétérogène est le mode largement privilégié pour la formation des cristaux de glace (Kärcher et al. (1998a)).

1.5.1.2 Forme des particules de glace

Dans les premières phases de l'évolution des traînées de condensation, les cristaux de glace sont considérés comme des particules sphériques (Schröder & othersS (2000) ; Gayet et al. (2012)). Puis, selon les conditions thermodynamiques locales, de nouvelles variétés de formes de particules de glace naissent dans le sillage de l'avion. Ces formes et variétés sont regroupées en différentes catégories présentées dans la figure 1.7.

	Droxtal		Rosette
	Colonne		Plaquette
	Colonne creuse		Agrégats










Dimension D	Formes rencontrées
$D < 60 \mu\text{m}$	100 % 
$60 \mu\text{m} < D < 1 \text{ mm}$	15 %  + 50 %  + 35 % 
$1 \text{ mm} < D < 2 \text{ mm}$	45 %  + 45 %  + 10 % 
$2 \text{ mm} < D$	97 %  + 3 % 

FIGURE 1.7 Évolution des particules de glaces selon Yang *et al.* (2010)

D'après la figure 1.7, les cristaux de glace ont une forme de dorxtals en dessous de $60 \mu m$ et ils prennent la forme de plaquettes, de colonnes, de rosettes et parfois la coagulation forme des agrégats au-dessus de cette valeur. Dans les premiers instants de vie des traînées de condensation, les particules sont considérées comme sphériques.

1.5.1.3 Processus de croissance des particules de glace

La croissance des particules de glaces existantes ou nouvellement formées est majoritairement pilotée par le processus de condensation. Ce dernier est un phénomène thermodynamique à l'échelle microscopique qui a pour origine un changement de phase vapeur/liquide ou vapeur/solide. La condensation de la vapeur est pilotée par le rapport entre la pression de vapeur dans un milieu et la pression de vapeur saturante (la pression où la phase gazeuse d'une substance est en équilibre avec sa phase liquide ou solide). Ce rapport est appelé rapport de saturation, noté S , et il est défini comme :

$$S = \frac{P_v}{P_{sat}(T)} \quad (1.5)$$

Avec P_v la pression partielle de vapeur d'eau et $P_{sat}(T)$, la pression de vapeur saturante qui ne dépend que de la température T . Il existe trois valeurs pour la saturation :

- $S < 1$ le milieu est sous-saturé
- $S = 1$ le milieu est à l'équilibre
- $S > 1$ le milieu est sur-saturé. L'air ne peut plus contenir de la vapeur d'eau qui se condense alors sous forme liquide ou solide.

Ainsi, avec une quantité fixe de vapeur d'eau contenue dans le panache, une chute suffisante de température sature ce dernier et conduit à la formation d'une phase condensée. Ce phénomène de baisse de température déclenche ainsi la formation et la croissance des cristaux de glace dans le sillage de l'avion. Le critère de Schmidt-Appleman indique qu'une traînée de condensation se forme dans le sillage de l'avion lorsque le mélange entre les effluents et l'air ambiant atteint un

rapport de saturation par rapport à l'eau liquide supérieur à l'unité, c'est-à-dire que ce dernier se trouve dans un environnement sursaturé (Appleman (1953); Schumann (1996)). En résumé, la condensation de la vapeur d'eau a lieu à la surface des suies si le panache se trouve dans une région sursaturée en eau.

L'humidité relative, notée RH est une variante du rapport de saturation S. Elle est définie comme le rapport entre la pression de vapeur d'eau et la pression de vapeur saturée par rapport à l'eau liquide :

$$RH = \frac{P_v}{P_{sat/liq}(T)} \times 100 \quad (1.6)$$

En plus, étant donné que les particules sont considérées comme sphériques dans les premiers instants de vie des traînées de condensation (Paragraphe 1.5.1.2), une énergie supplémentaire est nécessaire pour que la phase condensée soit sous une forme sphérique. Ce dernier est l'effet Kelvin. La pression de vapeur saturante par rapport à une interface sphérique, $P_{sat/S}$, est plus importante que son équivalent par rapport à une surface plane, P_{sat} (Seinfeld & Pandis (2006)). La pression de vapeur saturante en prenant en compte l'effet Kelvin est définie pour une particule sphérique de rayon r_p , de masse volumique ρ_p , de masse molaire M_v , à une température donnée T_p par :

$$P_{sat/S} = \exp\left(\frac{2\sigma M_v}{r_p \rho_p R T_p}\right) \times P_{sat} \quad (1.7)$$

σ est la tension surfacique et R est la constante des gaz parfaits.

1.5.2 Modélisation numérique de la formation des traînées de condensation

Les traînées de condensation sont formées de particules de glace. Donc, comprendre leur évolution est un processus primordial dans la modélisation d'une traînée de condensation. Les processus microphysiques représentent l'ensemble des phénomènes intervenant à la formation et à la croissance de cristaux de glace dans le panache, à une échelle microscopique. Les particules

de glaces sont majoritairement formées par la condensation de la vapeur d'eau sur des particules de suie en sortie de moteur.

Expérimentalement, le programme de mesure allemand SULFUR (Schumann & Arnold, 2002) a été effectué pour déterminer les propriétés des aérosols et la formation des traînées de condensation en sortie des réacteurs des avions pour différents teneurs en soufre du carburant, différentes conditions de vol, et différents types d'avion (ATTAS, A310, A340, B707, B747, B737, DC8, DC10). Ce dernier a permis d'obtenir les propriétés des traînées de condensation telles que l'épaisseur optique, la taille et la densité numérique des particules (représente un « paquet » de particules physiques) dans un panache âgé de 1 seconde. Plus récemment, on peut citer le programme de mesure de la NASA, Alternative-Fuel Effects on Contrails and Cruise Emissions (ACCESS I and II) (Anderson (2015)). Ce dernier permet d'évaluer l'impact des carburants alternatifs, en particulier ceux à faible ou zéro teneur en soufre, sur la formation des traînées de condensation. Les résultats ont montré que les biocarburants peuvent réduire le nombre de particules de suie, mais peuvent conduire à des particules de glaces de plus grosses tailles.

Par ailleurs, il existe plusieurs approches pour modéliser numériquement la formation des traînées de condensation. La revue de la littérature permet entre autres de voir les bénéfices et les contraintes de chaque méthode.

Par exemple, Paoli et al. (2004a) ont étudié la formation des traînées de condensation dans le sillage d'un avion. Leur approche consiste à modéliser la phase gazeuse par la simulation des grandes échelles tandis que la phase solide (particules) est traquée par une méthode Lagrangienne, tout cela couplé à un modèle microphysique simple. Leur modèle microphysique repose sur une loi de diffusion simple établie par Kärcher et al. (1996). De même, en adoptant la même approche, Paoli & Garnier (2005a) ont mis en place un modèle numérique couplant la dynamique des fluides et la microphysique pour l'étude de l'interaction entre le jet propulsif et les tourbillons de sillage. Dans la même optique, Garnier et al. (2014) ont étudié l'effet de la compressibilité sur la formation des traînées de condensation. Leurs travaux consistent à analyser l'effet du

nombre de Mach (correspondant à différentes vitesses de sortie du moteur) sur le comportement de l'écoulement du jet et, par conséquent, sur l'évolution des particules de glaces et de suies. Comme dans les travaux cités précédemment, la dynamique de l'écoulement et des particules est modélisée par une approche eulérienne/lagrangienne (la partie gaz est résolue par la simulation des grandes échelles) et cette dynamique est couplée à un modèle microphysique se basant sur celui de Fukuta & Walter (1970), cette modélisation est considérée comme une approche microphysique simple. Il est à remarquer que les auteurs cités ci-devant ne prennent en compte que les particules de glaces. Il est mis en avant que les difficultés de modélisation augmentent si des phénomènes physiques (processus chimique, modélisation des aérosols) supplémentaires doivent être pris en compte (Menon & Wu, 1998). Les modélisations ci-dessus mettent en avant une modélisation de la dynamique de l'écoulement (jet turbulent) complexe, en simulation des grandes échelles (LES), couplée à un modèle microphysique simple. Par souci de coût de calcul, la simulation temporelle a été choisie pour modéliser numériquement le jet turbulent. Cette approche se focalise donc sur la dynamique du jet turbulent en sortie de moteur.

D'autres études mettent en avant une autre approche pour traiter la formation des traînées de condensation et les modèles microphysique associés. À titre d'exemple, Yu & Turco (1998) modélisent la formation et l'évolution des aérosols dans le panache à l'aide d'un modèle de microphysique des aérosols qui résout explicitement la taille des particules et leur composition. Dans leur étude, deux approches sont utilisées pour simuler la microphysique : une approche classique, dans lequel la formation nouvelle de particules se produit d'abord par l'intermédiaire de nucléation homogène, suivie par la condensation et la coagulation ; et une approche cinétique, dans laquelle l'ensemble du parcours d'évolution des particules est calculé en tant que mécanisme de collision. Par contre, la dynamique du panache est très simplifiée, l'entraînement est représenté par un mélange uniforme instantané à travers la section transversale du panache. De même, Wong *et al.* (2008), mettent en avant un modèle microphysique unidirectionnelle plus détaillée couplée à une dynamique du jet plus simple. Ce dernier est basé sur les données prises sur la sortie du moteur d'avion (modèle CFM56-2C1) éditée par l'organisation de l'aviation civile internationale (ICAO) et sur l'approche semi-empirique proposée par Davidson & Wang (2002). Mais ils

indiquent que le modèle proposé par Davidson-Wang ne saisit pas l'ensemble des propriétés du champ d'écoulement en détail comme pour une simulation CFD, mais c'est un moyen simple et rapide pour fournir la dynamique de l'écoulement. Leur modèle microphysique se base sur une combinaison de nucléation binaire homogène de $H_2SO_4-H_2O$, de la coagulation de particules volatiles, de la condensation de la suie, et d'une théorie quasi cinétique de nucléation. La comparaison de leur modélisation avec des résultats expérimentaux montre que leur outil est capable de capturer des tendances générales de la microphysique des particules de glace. De même, Wong et al. (2014a) ont utilisé la même méthodologie et le même modèle microphysique pour modéliser la formation d'acides organiques et sulfuriques sur les particules de suie émises dans le champ proche de l'avion. L'analyse de la revue de littérature de cette approche a permis de se focaliser sur l'évolution des particules, la microphysique et la chimie de la formation des traînées de condensation. Cependant, ce type d'analyse ne prend pas en compte les phénomènes physique se produisant dans la dynamique du jet turbulent en sortie de moteur.

Vancassel et al. (2014) ont utilisé une autre approche pour étudier la formation de traînées de condensation. Leur approche se base sur le modèle de trajectoire de boîte (Kärcher, 1995 ; Sorokin et al., 2001). Les trajectoires des particules sont calculées par la simulation des grandes échelles et sont implémentées dans un code qui modélise l'interaction entre la microphysique et les aérosols. Leur modèle microphysique détaillée permet l'interaction multiple entre les divers types de particules : particules de suies, particules de glaces et aérosols.

1.6 Parallélisation

La CFD n'a eu de cesse d'évoluer dans ses techniques de discrétisation (différences finies, volumes finis, éléments finis) ainsi que dans ses champs d'applications (Météorologie, aéronautique et spatial). En particulier, le développement depuis quelques années des ressources de calcul informatiques a rapidement été mis à profit pour les applications CFD. Ce besoin d'une capacité croissante de calcul est motivé non seulement par une plus grande complexité physique des problèmes considérés, mais aussi par la particularité des méthodes développées jusqu'à aujourd'hui pour résoudre les équations de Navier-Stokes.

Pour l'approche LES, la résolution spatiale requise est cependant proportionnelle à la taille des plus petites structures. Ainsi, une LES requiert une taille de problème d'autant plus importante que le nombre de Reynolds augmente (Pope, 2001), puisque la gamme d'échelles associée s'élargit. Ainsi, pour pouvoir résoudre ces simulations numériques de grande dimension dans un temps raisonnable, une parallélisation est nécessaire. Dans la littérature, Hoefflinger et al. (2001) décrivent une méthode de parallélisation d'un code CFD en utilisant OpenMP. Cette méthode se base sur la décomposition de domaine avec OpenMP. Par la suite, Lunet (2018) a utilisé des stratégies de parallélisation espace-temps pouvant être appliquées efficacement à un solveur CFD explicite. Ils ont observé que les solutions obtenues donnent une bonne représentation des propriétés physiques des écoulements turbulents considérés. Par ailleurs, Amritkar et al. (2014) ont décrit une stratégie de parallélisation pour la méthode des éléments finis utilisée pour simuler la phase dispersée couplée à la CFD. Leur stratégie se base sur l'utilisation des threads OpenMP. De ce fait, la stratégie de parallélisation du code FLUDILES se basera sur l'utilisation de la bibliothèque OpenMP. Mais dans un premier temps, une présentation des architectures de calcul, des moyens de calcul haute performance actuels ainsi que la bibliothèque OpenMP est faite.

1.6.1 Les architectures de calcul

La programmation parallèle permet de tirer avantage des architectures informatiques parallèles et ce dernier repose sur trois éléments :

- L'unité de calcul ou cœur de calcul : c'est le composant qui permet de faire les opérations numériques de base telles que l'addition et la multiplication. De plus, il permet de gérer la manipulation des données en mémoire telles que les accès, les remplacements et les déplacements. Dans une architecture de calcul, plusieurs cœurs de calcul sont regroupés au sein d'un processeur. Les processeurs sont regroupés en nœuds de calculs (nodes) et ces derniers sont regroupés en rangs au sein du supercalculateur.

- La mémoire : c'est l'espace où sont stockées les données de calcul. Elle est répartie en plusieurs niveaux, chacun étant caractérisé par une taille de stockage et une vitesse d'accès. Selon les niveaux considérés, le temps d'accès diminue avec la taille mémoire disponible.
- le réseau de communication : c'est le composant qui permet aux différents cœurs de calcul de communiquer entre eux, i.e pour le partage de données. Ces communications se font à différente vitesse ou débit et sont relatives à chaque machine de calcul, mais aussi selon la position de chaque cœur.

La vitesse de calcul d'un supercalculateur dépend généralement de la combinaison de ces trois éléments principaux. Ce dernier est généralement mesuré en FLOP (Floating Point Operations) par seconde (FLOP/s).

1.6.2 Les moyens de calcul haute performance actuels

Le calcul parallèle consiste à exécuter simultanément une même tâche, afin de pouvoir être répartie entre plusieurs processeurs, en vue de traiter plus rapidement des problèmes de grande taille. Ainsi, pour pouvoir réaliser ces calculs parallèles, des supercalculateurs ou les architectures HPC ont été mis en place. Les supercalculateurs ou les architectures HPC ne cessent d'évoluer au cours du temps grâce aux avancées technologiques de leurs composants de base, tels que les processeurs (CPU, Computational Processing Unit) et les cartes graphiques (GPU, Graphics Processing Unit), ainsi que par l'augmentation de leur nombre de cœurs de calcul. Pour mieux utiliser ces machines, des modèles de programmation permettant d'effectuer des calculs en utilisant plusieurs processus en parallèle ont été développés. Parmi ces modèles, deux concepts se sont imposés :

- Modèle à Mémoire Partagée (MMP)

La mémoire est dite partagée lorsque tous les processeurs sont connectés, généralement par un bus, à une mémoire centrale globale. De ce fait, l'ensemble des données du problème se situe sur une mémoire accessible à un ensemble de processus. Ce modèle est généralement utilisé par le biais de la norme OpenMP (Open MultiProcessing).

- Modèle à Mémoire Distribuée (MMD)

Les architectures à mémoire distribuée sont constituées de plusieurs ordinateurs, ou nœuds de calcul, connectés par un réseau où chacun possède une mémoire centrale. Ainsi, l'espace mémoire permettant de stocker les données du calcul est différent pour chaque processus. Ces derniers échangent des données par le biais des réseaux de communication au cours du calcul. Ce modèle est généralement utilisé par le biais de la norme MPI (Message Passing Interface).

Ces deux modèles ont leurs avantages et inconvénients. Le modèle MMD permet de résoudre les problèmes de grandes tailles, en distribuant le problème sur un grand nombre d'unités de calcul. Ce dernier induit un échange considérable de données qui augmentent avec le nombre de processus utilisés. Ce qui entraîne l'utilisateur à minimiser ces communications internodales pour avoir un code efficace. Le MMP permet de se passer de ces communications entre processus, mais induit une certaine latence au cours des accès à la mémoire. De plus, ce dernier est limité par la mémoire physique sur un même composant et est alors inapplicable sur des problèmes de très grande taille.

1.6.3 Bibliothèque de parallélisation OpenMP

Une parallélisation avec OpenMP est basée sur le modèle « Fork and Join ». Ce modèle utilise des processus appelés « threads » et ces derniers sont ensuite assignés aux cœurs de calcul. Ainsi dans OpenMP, des blocs parallèles sont insérés dans le programme séquentiel, dans le cas ci-présent, FLUDILES. Lors du calcul en parallèle, le thread initial (la partie séquentielle du code) rencontre une région parallèle, ce dernier crée une équipe de threads dont il fait lui-même partie. Le code à l'intérieur de la section parallèle définit les tâches qui seront attribuées à chacun d'eux. Lorsque tous les membres de l'équipe ont fini leurs tâches, les threads sont supprimés à l'exception du thread maître qui poursuivra l'exécution du reste du programme.

Pour créer une région parallèle dans OpenMP, la directive *OMP PARALLEL* est appelée. Cette dernière est écrite de la manière suivante en FORTAN :

Extrait de code 1.1 Exemple d'une région parallèle dans OpenMP

```
!$OMP PARALLEL [ clause ]
    Block
!$OMP END PARALLEL
```

Les clauses permettent de contrôler les environnements entourant les sections parallèles. *Block* représente ici un ensemble d'instruction Fortran et la région à paralléliser. OpenMP ne requiert pas une refonte majeure du code ou du programme. Seulement les sections où le programme passe le plus de temps (sections critiques) doivent être modifiées. OpenMP est donc un moyen rapide et peu coûteux pour paralléliser un programme.

Comme indiqué plutôt, dans les sections parallèles, chaque thread créé par la directive *parallel* est assigné à une tâche dans cette région. Les threads exécutent donc les mêmes instructions. Pour avoir une parallélisation plus performante, d'autres directives sur les boucles ou sur les segments à l'intérieur du code sont donc nécessaires. Dans le cas du code FLUDILES, la directive de boucle est la plus utilisée. Elle consiste à distribuer les itérations de la boucle parmi les régions créées par la directive *parallel*. Ainsi, l'exécution de la boucle se fait, par la suite, en parallèle. En Fortran, ce dernier s'écrit de la manière suivante :

Extrait de code 1.2 Parallélisation d'une boucle dans OpenMP

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO [ clause ]
    Boucle
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

Dans le cadre de la parallélisation de FLUDILES, la directive *schedule* a été choisie pour les *clauses*. Ce dernier permet de définir les moyens de distribution des itérations de la boucle parallélisée par des algorithmes. Ces algorithmes correspondent à *static*, *dynamic* et *guided*. Lors

d'un calcul parallèle, les tâches peuvent s'accomplir à des vitesses différentes, ainsi l'algorithme *static* permet à un thread plus rapide d'attendre que ces homologues finissent leur tâche menant ainsi à une perte de performance. L'algorithme *dynamic* corrige ce problème en attribuant dynamiquement les tâches. Ainsi un thread plus rapide exécutera plus d'itérations. Enfin, l'algorithme *guided* est un compromis entre les deux, c'est-à-dire que ce dernier distribue les tâches importantes au début et au fur et à mesure que les threads en font la requête.

Une autre directive utilisée dans les régions parallèles dans FLUDILES est la directive *sections*. Ce dernier distribue des blocs du programme aux différents threads créés par la région parallèle. Un appel à la directive *Sections* est défini de la manière suivante :

Extrait de code 1.3 Création d'une sections parallèle dans OpenMP

```
!$OMP PARALLEL SECTIONS
    !$OMP SECTION
        block
    !$OMP SECTION
        block
!$OMP END PARALLEL SECTIONS
```

1.6.4 Accélération et efficacité

L'accélération d'un algorithme sur nombre de processeurs pr , (A_p), est donnée par le rapport du temps d'exécution séquentiel de l'algorithme t_{seq} divisé par le temps d'exécution parallèle de l'algorithme sur p processeurs (t_p) :

$$A_p = \frac{t_{seq}}{t_{pr}} \quad (1.8)$$

Où t_p est le temps maximum d'exécutions mesuré sur chacun des processeurs.

L'efficacité d'un algorithme (E_p) se définit comme le rapport de l'accélération de l'algorithme sur un nombre donné processeurs, divisée par le nombre de processeurs p . L'efficacité représente l'utilisation moyenne des processeurs par rapport à une parallélisation parfaite. Une parallélisation parfaite signifie que tous les processeurs sont utilisés au maximum pour effectuer les opérations utiles pour l'application.

$$E_p = \frac{A_p}{pr} = \frac{t_{seq}}{pr \times t_p} \quad (1.9)$$

1.7 Objectifs des travaux de recherche

La revue de littérature a permis tout d'abord de souligner l'importance du jet en sortie de moteur sur la formation de la traînée de condensation. En effet, cet écoulement a un impact majeur sur la formation des cristaux de glace et leur développement dans le panache. Il influence l'ensemble des propriétés des particules à savoir leur nombre, leur taille et la vitesse à laquelle elles se forment ainsi que leur concentration. En ce qui concerne la modélisation numérique du jet turbulent, l'approche LES est privilégiée. Cette méthode permet d'acquérir plus de fidélité quant à la résolution des instationnarités des grandes et petites échelles dans le jet turbulent ainsi qu'une meilleure représentation de la turbulence dans le jet et a un coût de calcul plus bas que l'approche DNS. Toutefois, le code FLUDILES modélise le jet en sortie de moteur par une approche temporelle. Cette approche permet de faire des calculs paramétriques rapides, mais ne permet pas de connaître l'état d'un écoulement en tout point de l'espace. Ainsi, une modification du code Fludiles pour pouvoir modéliser un jet avec une approche spatiale consistera en la première motivation de ce travail de thèse.

Dans la revue de littérature, deux approches existent pour tenir compte du jet dans la formation d'une traînée de condensation. La première approche consiste à modéliser la partie dynamique (jet turbulent) de manière simple, par le biais de méthode semi-empirique, afin de le coupler avec un modèle microphysique complet, prenant en compte les aérosols ainsi que les réactions chimiques. Une autre approche consiste à modéliser la partie dynamique de l'écoulement (jet

turbulent en sortie de moteur) par la simulation des grandes échelles. Cette modélisation du jet est couplée à un modèle de croissance de particule simplifié ne prenant en compte que le changement de masse des particules de glaces ainsi que l'évolution de leur rayon. Cette approche ne prend pas en compte les aérosols ainsi que les réactions chimiques. Par souci de coût numérique, la partie dynamique (jet turbulent) a été modélisée de manière temporelle. Compte tenu de l'hypothèse temporelle adoptée dans le cadre de l'approche pour modéliser le jet en sortie de moteur, il reste encore difficile de conclure sur l'impact de la turbulence sur la formation des cristaux de glace. Pour acquérir plus de fidélité quant à la formation et la croissance des cristaux de glace et mieux comprendre leur comportement dans la traînée de condensation, l'approche spatiale pour modéliser le jet est privilégiée. Ceci constitue donc la deuxième motivation de ce travail de thèse.

Par ailleurs, la revue de littérature a montré que le taux de dilution du moteur joue un rôle important sur la formation des cristaux de glace (Kärcher *et al.* (1996), Schumann (2000b), Detwiler & Jackson (2002)). Cet impact n'a pas été étudié pour la formation des traînées de condensation. Ceci représente donc la troisième et dernière motivation de cette thèse de recherche.

Ainsi, compte tenu des manques soulevés dans la revue de littérature et l'importance du jet en sortie de moteur, l'objectif principal de la thèse est d'approfondir la compréhension de la formation et de la croissance des particules de glace en utilisant et modifiant un code de CFD de haute précision avec un modèle microphysique intégré afin de pouvoir modéliser la formation d'une traînée de condensation en altitude de vol. Notre approche se distingue des travaux déjà effectués dans la littérature par un modèle numérique de la formation des traînées de condensation qui consistera à décrire la dynamique de l'écoulement dans le champ de l'avion et des particules résolues de manière détaillée ; la dynamique de la phase gazeuse est résolue par la simulation des grandes échelles et on optera pour une approche spatiale dans un premier temps, puis en temporelle pour la partie étude de sensibilité, tandis que la croissance des particules est modélisée par un modèle microphysique intégré au code FLUDILES. La modélisation

microphysique prendra en compte le modèle de Fukuta & Walter (1970), ce dernier est déjà implanté dans le code.

L'atteinte de cet objectif principal se fera au travers des sous-objectifs suivants :

- La modélisation et la validation numérique d'un jet rond turbulent spatial en sortie de tuyère .
- L'étude de la formation de la traînée de condensation en sortie de moteur.
- L'étude de sensibilité afin d'évaluer l'influence du taux de dilution du moteur sur la formation d'une traînée de condensation.

Les sous-objectifs représentent chacun un chapitre de la thèse et contribuent à remplir l'objectif principal. Le premier sous-objectif consiste à modéliser un jet turbulent à haut nombre de Reynolds avec le code FLUDILES et de valider les résultats obtenus avec ceux de la littérature. Cette comparaison se fait sur le champ turbulent et le champ moyens. Ensuite, le sous-objectif suivant consistera à analyser les capacités du code à modéliser la formation des traînées de condensation. Pour finir, le dernier sous-objectif consistera à faire une étude de sensibilité des caractéristiques d'un moteur d'avion sur la formation des particules de glaces. Mais dans un premier temps, les méthodes mathématiques et numériques, utilisées pour réaliser l'étude, vont être présentées dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 2

MODÉLISATION MATHÉMATIQUE ET NUMÉRIQUE

La première section de ce chapitre décrit le système formé par les équations de Navier-Stokes employées dans le cadre de l'étude. Les équations filtrées associées à la méthode de simulation des grandes échelles sont présentées dans une deuxième section.

2.1 Équation de la phase gazeuse et solide

2.1.1 Équation de la phase gazeuse

Les équations de Navier-Stokes instationnaires, dans le cas d'un écoulement compressible de fluide newtonien, sont formulées en variables conservatives (densité ρ , quantité de mouvement ρu_i , énergie totale et conservation de vapeur d'eau Y). Il est à remarquer que les équations sont adimensionnées au moyen des grandeurs de référence L_0 , U_0 , ρ_0 , T_0 , μ_0 et Z_0 qui représentent une longueur, une vitesse, une densité, une température, une viscosité dynamique et une fraction massique. Ces derniers sont définis comme :

$$u = \frac{u^*}{U_0}, T = \frac{T^*}{T_0}, \rho = \frac{\rho^*}{\rho_0}, P = \frac{P^*}{\rho_0 U_0^2}, E = \frac{E^*}{\rho_0 U_0^2}, \mu = \frac{\mu^*}{\mu_0}, Z = \frac{Y - Y_a}{Y_j - Y_a} \quad (2.1)$$

Où les variables dimensionnées sont marquées par le symbole (*). De ce fait, le système formé par l'équation de continuité, l'équation de quantité de mouvement, l'équation d'énergie totale et l'équation de la vapeur d'eau s'écrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial P}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(E + P)u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u_j}{\partial x_j} = \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) - \frac{\Pi_m}{Z_0} \frac{n}{n_0} \quad (2.5)$$

Ici t et x_i sont des variables indépendantes représentant respectivement le temps et les coordonnées spatiales. Les trois composantes de la vitesse sont notées u_i ($i=1, 2, 3$). La convention de sommation sur les indices répétés est utilisée.

Le tenseur des contraintes visqueuses est donné par :

$$\sigma_{ij} = \frac{\mu(T)}{Re} S_{ij} \quad (2.6)$$

où

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (2.7)$$

S_{ij} est le tenseur des taux de déformation, et δ_{ij} le symbole de Kronecker.

L'énergie totale E est définie comme :

$$E = \frac{P}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i \quad (2.8)$$

Le flux de chaleur q_j est donné par la relation :

$$q_j = \frac{-\mu(T)}{(\gamma - 1)RePrM^2} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (2.9)$$

La pression P , la température T et la densité ρ sont liées par la loi d'état des gaz parfaits :

$$P = \frac{\rho T}{\gamma M^2} \quad (2.10)$$

La fraction massique de la vapeur d'eau est une variable sans dimension, ce qui entraîne une normalisation de cette dernière par ses valeurs en sortie de moteur Y_j et dans l'air ambiant Y_a . De cette normalisation apparaît la nouvelle variable Z telle que :

$$Z = \frac{Y - Y_a}{Y_j - Y_a} \quad (2.11)$$

Π_m est le paramètre de couplage massique tel que :

$$\Pi_m = \frac{C}{St_m} \quad (2.12)$$

avec $C = \frac{n_0 m}{\rho_0}$ et t_m le temps caractéristique de condensation ou d'évaporation.

Les nombres sans dimensions sont :

- Le nombre de Reynolds de référence Re . Il compare les forces d'inertie aux forces de viscosité.

Il est défini comme :

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 L_0}{\mu_0} \quad (2.13)$$

- Le coefficient γ : rapport des chaleurs spécifiques à pression et à volume constant. Dans cette étude, afin de ne pas introduire de non-linéarité supplémentaire, on choisit de ne pas tenir compte de la variation des chaleurs spécifiques avec la température, et la valeur de γ est fixée à 1,4 ; qui est la valeur communément admise pour l'air.
- Le nombre de Prandtl de référence Pr est obtenu à partir de la viscosité dynamique de référence $\mu(T_0)$, de la chaleur spécifique à pression constante C_p , et de la conductivité

thermique k . Ce nombre sans dimension compare les transferts de quantité de mouvement associés aux forces visqueuses, aux transferts de chaleur par conduction. Le nombre de Prandtl est ici choisi constant et égal à 0,7 ; valeur représentative d'un écoulement d'air.

$$k = \frac{\mu_0 C_p}{Pr} \quad (2.14)$$

- Le nombre de Mach de référence M est défini comme :

$$M = \frac{U_0}{c_0} \quad (2.15)$$

où la vitesse du son de référence c_0 est donnée par la relation :

$$c_0 = \sqrt{\gamma r T_0} \quad (2.16)$$

r désigne le rapport : $r=R/M$

R est la constante universelle des gaz parfaits : $R=8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$

M est la masse molaire du gaz considéré, exprimée en kg mol^{-1}

Pour l'air, la valeur admise est : $r=287 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $C_p = 1030 \text{ JK}^{-1} \text{ kg}^{-1}$

2.1.2 Équation de la phase solide

Une approche lagrangienne est utilisée pour suivre les particules. Les particules sont considérées sphériques, de même taille, et de même position. La phase solide est en équilibre dynamique et thermique avec la phase fluide : la température T_p et la vitesse v de chaque particule au cours du temps sont donc égales à celles du fluide au point considéré. La position de chaque particule est donc calculée en intégrant l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dx_p}{dt} = u(x_p) \quad (2.17)$$

Où \tilde{u} est la vitesse du fluide au point x_p . La croissance des particules se fait lorsque l'écoulement turbulent émis par le moteur présente les conditions favorables à la nucléation hétérogène : au contact de l'atmosphère, le fluide refroidit, et la vapeur d'eau contenue dans l'écoulement se condense autour des particules. Ces conditions sont également dites de saturation. Ici, du fait de la petite taille des particules, le poids est négligeable par rapport à la force de traînée. Ainsi, les forces de pesanteur sont négligées du fait de la petite taille des particules (de l'ordre 1-2 micron). La taille des cristaux de glace, de forme sphérique, varie en fonction de la température du jet et l'humidité relative. La variation de masse de chaque particule est déterminée par (Garnier *et al.*, 2014 ; Maglaras, 2007) :

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{4\pi r_p D_v M_v}{RT_p} f_{3\beta} (P_w - P_{sat}) \quad (2.18)$$

Avec :

$$f_{3\beta} = \frac{r_p}{r_p + D_v \sqrt{\frac{2\pi M_v}{RT_p}}} \quad (2.19)$$

Où m_p est la masse d'une particule et D_v est la diffusivité de la vapeur dans l'air. M_v est la masse molaire de l'eau. $f_{3\beta}$ est un facteur de correction afin d'exprimer une nouvelle différence de densité. P_w est la pression partielle de vapeur d'eau et P_{sat} la pression de vapeur saturante de l'eau. L'équation précédente peut être réécrite de la manière suivante pour obtenir la variation de la taille des particules :

$$\frac{dr_p}{dt} = \frac{D_v M_w}{r_p RT_p \rho_p} f_{3\beta} (P_w - P_{sat}) \quad (2.20)$$

D'où, le rayon des particules s'obtient par la relation de Fukuta-Walter (Fukuta & Walter (1970)) :

$$r_p \frac{dr_p}{dt} = \frac{S - A}{C_i A + C_p} \quad (2.21)$$

Où

$$A = \exp\left(\frac{2\sigma M_v}{r_p \rho_p RT_p}\right) \quad (2.22)$$

Et

$$S = \frac{P_w}{P_{sat}} \quad (2.23)$$

Avec :

$$C_t = \bar{r}^2 L_0 U_0 \left(\frac{L^2 M_v \rho_p}{k_g RT_p^2 f_{3\alpha}} \right) \quad (2.24)$$

$$C_p = \bar{r}^2 L_0 U_0 \left(\frac{RT_p \rho_p}{p_{sat} D_v M_v f_{3\beta}} \right) \quad (2.25)$$

Et

$$f_{3\alpha} = \frac{r_p}{r_p + \frac{k_g \sqrt{2\pi M_a RT_p}}{P(C_{p,a}-R/2)}} \quad (2.26)$$

Où S est le rapport de saturation (entre P_w et P_{sat}), A décrit l'effet Kelvin et est défini comme le rapport entre la pression de vapeur partielle à la surface des gouttelettes d'eau et la pression de vapeur saturante sur une surface plane à la température de gouttelette. C_t et C_p sont les facteurs associés à l'accroissement et l'évaporation des particules. $f_{3\alpha}$ est un facteur de corrections qui prend en compte la différence de température entre la température et l'air ambiant et α est le coefficient d'accommodation thermique qui décrit le transfert de chaleur par les molécules atteignant ou quittant l'interface entre le gaz et la phase condensée. De ces équations, la variation de masse de chaque cristaux de glace est obtenue et a fortiori le taux d'évaporation $\bar{\omega}$, le terme de couplage dans l'équation de vapeur.

$$\omega(x) = \frac{r_s^3}{Y_w} \cdot \frac{1}{V(x)} n_p \sum_{k=1}^{n_p} \rho_p 4\pi r_p^2 \frac{dr_p}{dt} \quad (2.27)$$

Où Y_w est la variation du taux d'évaporation, r_s un nombre sans dimension dépendant du rayon initial des particules de suies et n_p est le nombre de particules, avec une densité ρ_p , contenu dans un volume $V(x)$.

2.2 Méthode numérique

2.2.1 Équations pour la simulation des grandes échelles

2.2.1.1 Définition et propriétés du filtre

La simulation des grandes échelles est basée sur l'idée de la séparation des échelles ou de filtrage avec un formalisme mathématique bien établie. Nous limitons notre présentation ici à des définitions fondamentales.

Le cadre de cette section est limité au cas idéal de la turbulence homogène. Cela implique que le filtre doit respecter les propriétés physiques d'isotropie et d'homogénéité d'après Garnier, Adams & Sagaut (2009). De plus, les propriétés de filtration sont indépendantes de la position et de l'orientation de la trame de référence dans l'espace. En conséquence, l'échelle de coupure est constante et identique dans toutes les directions spatiales.

Le formalisme mathématique associé à la notion de filtrage (ou de séparation d'échelles) fait l'objet du présent paragraphe. Soit f une variable caractéristique de l'écoulement, elle peut être décomposée suivant :

$$f = \bar{f} + f' \quad (2.28)$$

La séparation d'échelles est réalisée par l'application d'un filtre passe-haut en échelles (i.e. passe-bas en fréquence) à la solution exacte. \bar{f} représente la partie basse fréquence (ou contribution grande échelle) de f , et f' son complémentaire, qui correspond donc à la partie haute fréquence. Ce filtrage est représenté mathématiquement dans l'espace physique comme un produit de convolution.

Ainsi, la partie résolue \bar{f} est définie formellement par la relation :

$$\bar{f} = \int_{\Omega} G_{\Delta}(x - \xi) f(\xi) d\xi \quad (2.29)$$

où Ω désigne l'ensemble du domaine fluide.

Cette relation est notée symboliquement

$$\bar{f} = G_{\Delta} f \quad (2.30)$$

De sorte que :

$$f' = (1 - G_{\Delta}) f \quad (2.31)$$

Le noyau de convolution G_{Δ} est caractéristique du filtre utilisé. Il dépend de la longueur de coupure du filtre Δ et doit vérifier la relation de normalisation suivante :

$$\int_{\Omega} G_{\Delta}(x - \xi) d\xi = 1 \quad (2.32)$$

Les filtres typiquement utilisés en simulation des grandes échelles sont les filtres « boîte », « Gaussien » et « porte ». Afin de permettre la manipulation des équations de Navier-Stokes, après l'application d'un filtre, on impose à ce dernier de vérifier les trois propriétés de conservation des constantes, de linéarité et de commutativité avec la dérivation. En d'autres termes :

$$\bar{a} = a \text{ si } a = \text{cste} \quad (2.33)$$

$$\overline{\Phi + \Psi} = \bar{\Phi} + \bar{\Psi} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial s} = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial s}, s = x_i, t, i = 1, 2, 3 \quad (2.35)$$

Les filtres qui vérifient les trois propriétés précédentes ne sont pas, dans le cas général, des opérateurs de Reynolds, i.e. :

$$\overline{\overline{\Phi}} = G_{\Delta}^2 \Phi \neq \overline{\Phi} = G_{\Delta} \Phi \quad (2.36)$$

$$\overline{\Phi'} = G_{\Delta}(1 - G_{\Delta})\Phi \neq 0 \quad (2.37)$$

Ceci implique que l'opérateur de filtrage peut être inversé : il n'y a donc pas de perte d'information par l'application du filtre. Le noyau de l'application est réduit à l'élément nul, i.e. $\ker(G_{\Delta}) = 0$. Dans le cas où le filtre serait un opérateur de Reynolds, le filtrage ne peut plus être inversé, car son noyau $\ker(G_{\Delta}) = f'$, n'est plus réduit à l'élément nul, et en conséquence le filtrage induit une perte irréversible d'information.

La méthode la plus généralement employée pour définir la longueur de coupure du filtre est celle proposée par Deardorff, selon laquelle $\Delta = \Delta_{iso}$ est définie comme :

$$\Delta_{iso} = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{\frac{1}{3}} \quad (2.38)$$

Ici Δ_x , Δ_y et Δ_z désignent respectivement les pas de discrétisation spatiale dans les directions x, y et z de la maille considérée. Cette dernière définition de Δ_{iso} suppose que $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z$.

2.2.1.2 Filtre de Favre

En simulation des grandes échelles d'écoulements compressibles, le changement de variable par pondération par la masse volumique est largement employé (Garnier *et al.* (2009), Gago (2002)). Cette méthode consiste à écrire :

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho} \tilde{f} \quad (2.39)$$

Ainsi une variable scalaire ou vectorielle peut être décomposée suivant :

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (2.40)$$

On peut souligner le fait que l'opérateur (\sim) est linéaire, mais ne commute pas avec les opérateurs de dérivation en temps et en espace :

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial s} \neq \frac{\partial \tilde{f}}{\partial s}, s = x_i, t, i = 1, 2, 3 \quad (2.41)$$

2.2.1.3 Équations filtrées

On s'attache ici à écrire les équations utilisées en simulation des grandes échelles. Dans cette optique, on applique un filtre aux équations de Navier-Stokes. Ce filtrage en fréquence induit un nombre important de termes de sous-maille qu'il faudra modéliser. On fera apparaître dans les membres de gauche des équations filtrées, uniquement que des termes calculables. Ceux de droite seront exclusivement composés de termes de sous-maille.

Équation de continuité

Le filtrage en fréquence appliqué à l'équation de conservation de la masse (2.2) peut s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.42)$$

En utilisant le changement de variable de Favre, on obtient une équation d'évolution filtrée ne contenant aucun terme de sous-maille. C'est d'ailleurs pour cette principale raison que ce changement de variable a été introduit. On obtient finalement :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.43)$$

Équation de quantité de mouvement

De la même façon, on aboutit à l'équation de quantité de mouvement filtrée suivante :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial\widehat{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma}_{ij} - \widehat{\sigma}_{ij}) \quad (2.44)$$

L'expression 2.44 fait apparaître deux termes de sous-maille :

le tenseur de sous-maille,

$$A_1 = \tau_{ij} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (2.45)$$

et le terme

$$A_2 = (\overline{\sigma}_{ij} - \widehat{\sigma}_{ij}) = \frac{\overline{\mu(T)S_{ij}}}{Re} - \frac{\mu(\tilde{T})\tilde{S}_{ij}}{Re} \quad (2.46)$$

avec

$$\widetilde{S_{ij}} = \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (2.47)$$

Ces deux termes de sous-maille A_1 et A_2 résultent du caractère non-linéaire du terme convectif et du terme visqueux apparaissant dans l'expression 2.3. Afin de fermer le problème, il faudra exprimer ces deux termes en fonction des variables de base filtrées, ici $\bar{\rho}$ et \tilde{u}_i .

Équation de conservation de l'énergie

Après filtrage de l'équation de conservation de l'énergie (2.4) on obtient :

$$\frac{\partial\widehat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}\{(\widehat{E} + \bar{p})\tilde{u}_j\} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\widehat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) + \frac{\partial\widehat{q}_j}{\partial x_j} = -B_1 - B_2 - B_3 - B_4 - B_5 - B_6 - B_7 \quad (2.48)$$

avec :

$$\widehat{E} = \frac{\bar{p}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_i \quad (2.49)$$

et

$$\widehat{q}_j = \frac{-\mu(\widetilde{T})}{(\gamma - 1)RePrM^2} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_j} \quad (2.50)$$

Les termes B_j , sont des termes de sous-maille qu'il faudra exprimer à l'aide d'un modèle de turbulence.

$$B_1 = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{pu_j} - \overline{p} \widetilde{u}_j) \quad (2.51)$$

$$B_2 = \overline{p \frac{\partial u_k}{\partial x_k}} - \overline{p} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (2.52)$$

$$B_3 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{kj} \widetilde{u}_k) \quad (2.53)$$

$$B_4 = \tau_{kj} \frac{\partial}{\partial x_j} \widetilde{u}_k \quad (2.54)$$

$$B_5 = \overline{\sigma_{kj} \frac{\partial}{\partial x_j} u_k} - \overline{\sigma_{kj}} \frac{\partial}{\partial x_j} \widetilde{u}_k \quad (2.55)$$

$$B_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij}} \widetilde{u}_i - \widehat{\sigma_{ij}} \widetilde{u}_i) \quad (2.56)$$

$$B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{q_j} - \widehat{q}_j) \quad (2.57)$$

Le terme de corrélation pression-vitesse B_1 représente l'action de la turbulence de sous-maille sur la puissance des forces de pression à l'échelle résolue. Le terme de pression-dilatation B_2 ne rend compte que des effets purement compressibles, puisqu'il disparaît si l'écoulement est à divergence nulle (i.e. écoulement incompressible). Le terme $(B_3 - B_4)$ traduit le transport d'énergie cinétique des échelles résolues vers les échelles de sous-maille. La dissipation turbulente de sous-maille B_5 représente la quantité d'énergie cinétique transformée en énergie interne de fluide par frottement visqueux. Enfin, les deux derniers termes de sous-maille B_6 et B_7 sont dus aux non-linéarités respectives du terme visqueux et du flux de chaleur.

Équation de conservation de la vapeur d'eau

$$\frac{\partial \bar{\rho} Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) + \frac{\Pi_m}{Z_0} \frac{n}{n_0} = - \frac{\partial}{\partial x_j} C_1 \quad (2.58)$$

$$C_1 = \frac{1}{2} \left(-\bar{\rho} \mu_{sm} \frac{\partial Z}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\widehat{(\bar{\rho} Z \tilde{u}_j)} - \frac{\widehat{(\bar{\rho} Z)} \widehat{(\bar{\rho} \tilde{u}_j)}}{\widehat{(\bar{\rho})}} \right) \right). \quad (2.59)$$

Le filtrage de l'équation de conservation de la vapeur d'eau fait apparaître le tenseur de sous maille pour le flux de vapeur C_1 . Le filtrage du terme de couplage consiste à définir le volume élémentaire autour du point considéré correspond au volume de la maille centrée en ce point. Pour des soucis de coût de calcul, Gago (2002) a introduit une modélisation nécessaire pour la LES : l'utilisation de particules numériques. Ce dernier représente chacune n nombre de particules physiques. La particule numérique garde les caractéristiques de la particule physique (masse, position, vitesse).

2.2.1.4 Modèles de sous-maillles

La modélisation des termes de sous-maille présente dans l'équation de quantité de mouvement filtrée et dans l'équation de conservation de l'énergie dépend du code numérique utilisé. Cependant, FLUDILES ne présente que deux modèles de sous-maillles pour le terme A_1 présent dans l'équation de quantité de mouvement filtrée. Il s'agit du modèle Smagorinsky et de modèle Dynamic Smagorinsky (DSM).

2.2.1.4.1 Modélisation des termes de sous-maillles présent dans l'équation de quantité de mouvement

Cette section est destinée à la modélisation des termes de sous-maille apparaissant dans l'équation de quantité de mouvement filtrée (2.44) présentée à la section précédente. Cette dernière fait

apparaître deux termes de sous-maille. Le premier, A_1 , résulte du caractère non linéaire du terme convectif. Il est appelé tenseur de sous-maille et noté τ_{ij} . Le deuxième, A_2 , provient du caractère non linéaire du terme visqueux. Comme dans la grande majorité des études utilisant la méthode de simulation des grandes échelles, on choisit ici de ne pas tenir compte de l'influence du terme (Gago (2002), Garnier *et al.* (2009)).

On trouve dans la littérature un nombre conséquent de modèles pour le tenseur, en effet c'est le seul terme de sous-maille à apparaître dans le cas d'un fluide incompressible isotherme. Parmi l'ensemble de ces modèles de turbulence, nous avons choisi de présenter, de façon assez brève : le modèle de Smagorinsky. Ce dernier est dit modèle fonctionnel. Il est basé sur l'hypothèse selon laquelle le transfert d'énergie des échelles résolues vers les échelles de sous-maille se fait de manière analogue aux mécanismes de diffusion moléculaire. La partie déviatoire du tenseur de sous-maille est alors choisie proportionnelle au tenseur des taux de déformation résolus, et ce par l'intermédiaire d'une viscosité de sous-maille notée ν_{sm} . Ainsi, si le tenseur τ_{ij} est décomposé suivant sa partie isotrope τ_{ij}^I et sa partie déviatoire τ_{ij}^D :

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}^I + \tau_{ij}^D \quad \text{avec} \quad \tau_{ij}^I = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} \quad (2.60)$$

τ_{ij}^D sera évalué comme :

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = \tau_{ij}^D = -\bar{\rho} \nu_{sm} S_{ij}(\tilde{u}) \quad (2.61)$$

Modèle de Smagorinsky

Le modèle de Smagorinsky est de la forme :

$$\nu_{sm} = \nu_{sm}(\Delta \tilde{\epsilon}) \quad (2.62)$$

Où Δ est la longueur caractéristique du filtre et $\tilde{\epsilon}$ le flux d'énergie instantané à travers la coupure. Une analyse dimensionnelle simple montre que :

$$\nu_{sm} \propto \Delta^{\frac{4}{3}} \tilde{\epsilon}^{\frac{1}{3}} \quad (2.63)$$

De plus, dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, le taux de dissipation d'énergie cinétique est évalué comme :

$$\tilde{\epsilon} \propto \Delta^2 |S(\tilde{u})|^3 \quad (2.64)$$

En supposant que l'écoulement est en situation d'équilibre spectral constant ($\epsilon_1 = \tilde{\epsilon} = \epsilon$), et en remplaçant l'expression dans la relation 2.62, on a :

$$\nu_{sm} = (C_S \Delta)^2 |S(\tilde{u})| \quad (2.65)$$

avec

$$|S(\tilde{u})|^2 = \frac{1}{2} S_{ij}(\tilde{u}) S_{ij}(\tilde{u}) \quad (2.66)$$

Finalement, la partie déviatoire du tenseur de sous-maille est donnée par la relation :

$$\tau_{ij} = -\bar{\rho} (C_S \Delta)^2 |S(\tilde{u})| S_{ij}(\tilde{u}) \quad (2.67)$$

La valeur de la constante est souvent ajustée pour améliorer les résultats.

Le défaut majeur de ce modèle réside dans son caractère excessivement dissipatif. Plus généralement, on dira que le modèle de Smagorinsky ne permet pas de rendre compte convenablement des mécanismes de transition d'un état laminaire vers un état turbulent.

Procédure dynamique Germano-lilly

Afin de pallier l'excès dissipatif du modèle de Smagorinsky, une procédure dynamique de calcul de la constante C_S a été développée par Germano et al. (1991). Elle devrait permettre une meilleure adaptation du modèle à l'état local de l'écoulement. Cette procédure implique l'introduction d'un filtre test, associé à une longueur caractéristique supérieure à celle du filtre

courant. Ainsi, si le symbole $(\cdot)^\wedge$ désigne le filtre test, on a : $(\hat{\Delta}) > \Delta$. On considère le tenseur :

$$L_{ij} = T_{ij} - \tau_{ij} \quad (2.68)$$

τ_{ij} est donné par la relation 2.60 que l'on peut réécrire, en utilisant la définition du filtrage de Favre (2.39), sous la forme :

$$\tau_{ij} = \overline{\rho u_i u_j} - \frac{\overline{\rho u_i} \overline{\rho u_j}}{\overline{\rho}} \quad (2.69)$$

et T_{ij} représente le tenseur de sous-maille associé au filtrage test :

$$T_{ij} = \widehat{(\overline{\rho u_i u_j})} - \frac{\widehat{(\overline{\rho u_i})} \widehat{(\overline{\rho u_j})}}{\widehat{(\overline{\rho})}} \quad (2.70)$$

On applique alors le filtre test au tenseur L_{ij} pour obtenir :

$$L_{ij} = T_{ij} - \tau_{ij} = \widehat{(\overline{\rho \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}})} - \frac{\widehat{(\overline{\rho \widetilde{u_i}})} \widehat{(\overline{\rho \widetilde{u_j}})}}{\widehat{(\overline{\rho})}} \quad (2.71)$$

Comme nous le montre cette dernière expression, le tenseur L_{ij} peut être calculé directement à partir du champ résolu. On fait ensuite l'hypothèse que les deux tenseurs T_{ij} et τ_{ij} peuvent être modélisés de la même façon, de sorte que :

$$\tau_{ij} = C_s^2 \beta_{ij} \text{ avec } \beta_{ij} = -\overline{\rho} \Delta^2 | S(\widetilde{u}) | S_{ij}(\widetilde{u}) \quad (2.72)$$

$$T_{ij} = C_s^2 \alpha_{ij} \text{ avec } \alpha_{ij} = -(\overline{\rho})^\wedge (\hat{\Delta}^2) | S(\widehat{\widetilde{u}}) | S_{ij}(\widehat{\widetilde{u}}) \quad (2.73)$$

En appliquant le filtre test au tenseur τ_{ij} il vient :

$$\hat{\tau}_{ij} = (C_s^2 \beta_{ij})^\wedge \quad (2.74)$$

Étant donné que la constante C_s n'apparaît, dans l'expression 2.74 qu'au travers d'un produit filtré, il est nécessaire, pour pouvoir poursuivre la modélisation, de faire l'approximation :

$$(C_s^2 \beta_{ij})^\wedge = C_s^2 \hat{\beta}_{ij} \quad (2.75)$$

Le paramètre C_s sera calculé de manière à minimiser l'erreur commise : Lilly (1992) propose de déterminer la constante par une méthode de moindres carrés. Ainsi, C_s est solution du problème :

$$E_{ij} = L_{ij} - C_s^2 \alpha_{ij} + C_s^2 \hat{\beta}_{ij} \quad (2.76)$$

$$\frac{\partial E_{ij} E_{ij}}{\partial C_d} = 0 \quad \text{avec} \quad C_d = C_s^2 \quad (2.77)$$

Soit :

$$C_d = \frac{m_{ij} L_{ij}}{m_{kl} m_{kl}} \quad \text{avec} \quad m_{ij} = \alpha_{ij} - \hat{\beta}_{ij} \quad (2.78)$$

Cependant la constante ainsi calculée présente un comportement risquant d'être à l'origine d'instabilités numériques : elle n'est pas bornée (le dénominateur peut s'annuler).

2.2.1.4.2 Modélisation des termes de sous-maille présents dans l'équation de l'énergie

La présente section traite des termes de sous-mailles apparaissant dans l'équation de conservation de l'énergie.

Modélisation du terme de corrélation pression-vitesse : B_1

Rappelons que le terme B_1 représente l'action de la turbulence de sous-maille sur la puissance des forces de pression :

$$B_1 = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j} - \overline{p} \widetilde{u_j}) \quad (2.79)$$

A l'aide de l'équation d'état des gaz parfaits appliquée aux échelles résolues, le terme B_1 peut se réécrire :

$$B_1 = \frac{1}{\gamma M^2 (\gamma - 1)} \frac{\partial}{\partial x_j} q_{\theta j} \quad (2.80)$$

où $q_{\theta j}$ désigne le flux de chaleur de sous-maille :

$$q_{\theta j} = \bar{\rho}(Tu_j)^\sim \times \bar{\rho}\tilde{T}\tilde{u}_j \quad (2.81)$$

Par analogie avec l'expression du flux de chaleur résolu, présent dans l'équation de conservation de l'énergie, le terme prend généralement la forme suivante (Erlebacher et al., 1992 ; Hussaini, 1998) :

$$B_1 = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{\bar{\rho}v_{sm}}{(\gamma - 1)PrM^2} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right\} \quad (2.82)$$

Modélisation des termes de transport d'énergie cinétique : B_3 et B_4

Les termes B_3 et B_4 sont uniquement fonction du tenseur de sous-maille et du champ de vitesse résolu, ce qui rend leur modélisation immédiate, une fois choisi le modèle de turbulence pour le tenseur de sous-maille.

Modélisation du terme de dissipation turbulente de sous-maille : B_5

$$B_5 = C_\varepsilon \bar{\rho} \frac{k^{3/2}}{\Delta} \quad (2.83)$$

Avec :

$$k = \frac{\tau_{ll}}{2\bar{\rho}} \quad (2.84)$$

k est l'énergie cinétique turbulente de sous-maille, et C_ε un coefficient dynamique supposé n'être fonction que du temps. Dans le cadre de cette étude, on utilisera la procédure dynamique de détermination de C_ε . Sur la base de simulations numériques directes, Vreman (1995) a évalué l'importance relative des termes B_1 à B_7 . Cette étude montre clairement que les termes B_6 et B_7 , respectivement dus aux non-linéarités du terme visqueux et du flux de chaleur, sont d'une amplitude négligeable comparativement à celles des termes B_1 à B_5 . De même, Vreman (1995) indique que le terme de pression-dilatation B_2 reste d'une influence négligeable.

2.2.2 Méthode numérique

Ce chapitre présente les méthodes numériques utilisées pour résoudre les équations de Navier-Stokes filtrées (LES). Les variables vitesse, pression, température et densité sont discrétisées sur un maillage cartésien de m nœuds avec :

$$m = m_1 \times m_2 \times m_3 \quad (2.85)$$

$$[x, y, z] = [x, y, z] \quad (i, j, k) \quad (2.86)$$

$$i = 1, m_1; j = 1, m_2; k = 1, m_3 \quad (2.87)$$

Les trois premiers paragraphes traitent des schémas de discrétisation, et la dernière des conditions aux limites utilisées sur les frontières du domaine de calcul.

2.2.2.1 Discrétisation spatiale

Cette partie concerne les schémas de discrétisation spatiale utilisés pour notre étude. On distinguera la discrétisation des termes convectifs, précise au sixième ordre, de celle des termes dissipatifs effectués à l'ordre deux. L'ensemble des schémas est de type différences finies.

2.2.2.1.1 Discrétisation des termes convectifs

Un schéma compact d'ordre 6 est utilisé pour la discrétisation des termes convectifs présents dans les équations de continuité, de quantité de mouvement, d'énergie et de vapeur d'eau. Afin de faciliter la lecture, la direction x sera prise comme référence, les expressions des dérivées restant les mêmes quelque soit la direction considérée. Pour un nœud i , l'approximation de la dérivée première, ϕ'_i , est écrite sous la forme :

$$\alpha \phi'_{i-1} + \phi'_i + \alpha \phi'_{i+1} = b \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-2}}{4h} + a \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} \quad (2.88)$$

Où h désigne le pas d'espace spatial défini par : $h = x_{i+1} - x_{i-1}$. Les coefficients α , a et b sont obtenus en égalant les coefficients des développements limités d'ordre successifs.

- Premier cas : $3 \leq i \leq m_1 - 2$: $\alpha = 1/3$, $a = 14/9$ et $b = 1/9$. Le schéma est d'ordre six et l'erreur de troncature est de $4/7! \times h^6 \times \phi_i$.
- Deuxième cas : $i = 2$ et $i = m_1 - 1$: $\alpha = 1/4$, $a = 3/2$ et $b = 0$. Le schéma est d'ordre quatre et l'erreur de troncature est de $1/5! \times h^4 \times \phi_i$.
- Troisième et quatrième cas : $i = 1$ et $i = m_1$:

Le traitement des frontières par un schéma compact peut se faire à l'ordre quatre, trois ou deux. Parmi ces trois possibilités, nous avons opté pour le schéma d'ordre trois. En effet, pour les schémas d'ordre pair l'erreur de troncature est de type dispersif tandis que, pour celui d'ordre trois, elle est dissipative. On notera également que la partie dissipative de l'erreur associée au schéma compact d'ordre trois se concentre au niveau des grands nombres d'ondes.

L'approximation de la dérivée première au nœud $i = 1$ s'écrit :

$$\phi'_1 + 2\phi'_2 = 1/h \{2\phi_2 + 0,5\phi_3 - 2,5\phi_1\} \quad (2.89)$$

Le schéma est d'ordre trois et l'erreur de troncature est de $1/12 \times h^3 \times u_1$

L'approximation de la dérivée première au nœud $i = m_1$ s'écrit :

$$\phi'_{m1} + 2\phi'_{m1-1} = 1/h \{2,5\phi_{m1} - 2\phi_{m1-1} - 0,5\phi_{m1-2}\} \quad (2.90)$$

Le schéma est d'ordre trois et l'erreur de troncature est de $1/12 \times h^3 \times u_{m1}$

2.2.2.1.2 Discrétisation des termes visqueux

Les termes diffusifs sont discrétisés par un schéma centré d'ordre 2 et la dérivé première s'approche de la manière suivante, si le maillage est à pas constant :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta_i} \quad \text{avec} \quad \Delta_i = x_{i+1} - x_i \quad (2.91)$$

Sinon, la définition suivante est prise :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{\Delta_{i-1}/\Delta_i(\phi_{i+1} - \phi_i) + \Delta_i/\Delta_{i-1}(\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta_{i-1} + \Delta_i} \quad \text{avec} \quad \Delta_{i-1} = x_i - x_{i-1} \quad (2.92)$$

Ces définitions permettent de discrétiser les termes croisés présents dans la partie diffusive de l'équation de Navier-stokes tels que $\frac{\partial}{\partial x_i} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x_j}$ avec $i \neq j$. Cependant pour le cas $i = j$, de fortes oscillations apparaissent. De ce fait, les définitions suivantes sont utilisées :

- Si le maillage est à pas constant :

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{1}{2\Delta_i^2} \left\{ (\mu_i + \mu_{i+1})\phi_{i+1} - 2\left(\mu_i + \frac{\mu_{i-1} - \mu_{i+1}}{2}\right)\phi_i + (\mu_{i-1} + \mu_i)\phi_{i-1} \right\} \quad (2.93)$$

- Sinon :

$$\frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{1}{\Delta_{i-1} + \Delta_i} \left\{ (\mu_{i+1} + \mu_i) \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta_i} - (\mu_{i-1} + \mu_i) \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right\} \quad (2.94)$$

Les schémas 2.93 et 2.94 sont du second ordre tant que l'étirement du maillage reste faible entre deux mailles consécutives lorsque l'on utilise l'expression 2.94.

2.2.2.2 Discrétisation temporelle

L'intégration temporelle est faite à l'aide d'un schéma de Runge-Kutta d'ordre 3.

Ce schéma est facile à mettre en œuvre et il offre un bon compromis entre précision, stabilité, coût de stockage et temps de calcul.

Par souci de lisibilité, les équations sont écrites sous la forme symbolique :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = H(\phi) = -C(\phi) + D(\phi) - P(\phi) \quad (2.95)$$

Où ϕ représente les variables conservatives $[\rho, \rho u_i, E, Z]^T$ et les opérateurs C , D et P représentent respectivement les termes de convection, de diffusion et de pression. En prenant n comme incrément temporelle, le schéma de Runge-Kutta s'écrit de la sorte :

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \phi^n \\ \phi_1 &= \phi_0 + \gamma_1 \Delta t H_0 & H_0 &= H(\phi_0) \\ \phi_2 &= \phi_1 + \gamma_2 \Delta t H_1 & H_1 &= H(\phi_1) + \varepsilon_1 H_0 \\ \phi_3 &= \phi_2 + \gamma_3 \Delta t H_2 & H_2 &= H(\phi_2) + \varepsilon_2 H_1 \\ \phi^{n+1} &= \phi_3 \end{aligned} \quad (2.96)$$

Pour avoir un ordre 3, les coefficients γ_k et ε_k doivent vérifier le système suivant :

$$\begin{aligned} \gamma_1 + \gamma_2(1 + \varepsilon_1) + \gamma_3 \{1 + \varepsilon_2(1 + \varepsilon_1)\} &= 1 \\ \gamma_1 \gamma_2 + \gamma_3 \{\gamma_1 + (1 + \varepsilon_2) + \gamma_2(1 + \varepsilon_1)\} &= 1/2 \\ \gamma_1^2 \gamma_2 + \gamma_3 \{\gamma_1 + \gamma_2(1 + \varepsilon_1)^2\} + \gamma_1 \gamma_3 \varepsilon_2 &= 1/3 \\ \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 &= 1/6 \end{aligned} \quad (2.97)$$

Les valeurs préconisées par Gago (2002), Maglaras (2007) (méthode à faible encombrement en mémoire) sont :

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= 1/2 \\
\gamma_2 &= 0.9106836025229591 \\
\gamma_3 &= 0.3660254037844387 \\
\varepsilon_1 &= -0.6830127018922193 \\
\varepsilon_2 &= -4/3
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Le nombre de courant ou la condition de Courant-Fredricks-Levy (CFL) permet d'établir la stabilité d'un schéma numérique. Dans le cas de l'étude, la stabilité est donnée par la condition suivante :

$$\Delta t \leq \left(\frac{|u_1|}{\Delta x} + \frac{|u_2|}{\Delta y} + \frac{|u_3|}{\Delta z} + \frac{1}{M} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}} \right)^{-1} \tag{2.99}$$

2.2.2.3 Conditions aux limites spatiales

La définition des conditions aux limites sur les frontières transverses du domaine de calcul est délicate, car il faut ici simuler un jet non confiné et que cette dernière ne doit en aucun cas modifier la physique du jet. La formulation des conditions aux limites retenue fut celle des conditions de non-réflexion et dont l'objectif est de recréer avec des frontières artificielles le comportement d'un écoulement libre non confiné. Ce dernier présente de meilleurs résultats comparativement à ceux obtenus avec des conditions de périodicité et de symétrie (Givoli (1991), Bogey & Bailly (2002)).

Le principe de cette méthode est de linéariser à chaque pas de temps les équations de Navier-Stokes (i.e équation de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la vapeur). Ensuite, la méthode consiste à étudier les variables caractéristiques monodimensionnelles normales à la frontière considérée. Les équations de Navier-Stokes peuvent être réécrites de la manière suivante :

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + \bar{B} \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} + \bar{C} \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} = 0 \tag{2.100}$$

avec :

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} \rho & \rho u & \rho v & \rho w & p & Z \end{bmatrix}^T$$

$$\bar{\bar{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u^2 & 2u & 0 & 0 & 1 \\ -uv & v & u & 0 & 0 \\ -uw & w & 0 & u & 0 \\ -c^2u & c^2 & 0 & 0 & u \end{bmatrix} \quad \bar{\bar{B}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -uv & v & u & 0 & 0 \\ -v^2 & 0 & 2v & 0 & 1 \\ -vw & 0 & w & v & 0 \\ -c^2v & 0 & c^2 & 0 & v \end{bmatrix} \quad \bar{\bar{C}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -uw & w & 0 & u & 0 \\ -vw & 0 & w & v & 0 \\ -w^2 & 0 & 0 & 2w & 1 \\ -c^2w & 0 & 0 & c^2 & w \end{bmatrix}$$

Ici c désigne la vitesse du son.

$\bar{\bar{A}}$, $\bar{\bar{B}}$ et $\bar{\bar{C}}$ sont des matrices diagonalisables. La propagation de l'information dans une direction x_i donne l'équation du type :

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{\bar{M}} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x_i} = 0 \quad (2.101)$$

Où $\bar{\bar{M}}$ désigne la matrice $\bar{\bar{A}}$, $\bar{\bar{B}}$ ou $\bar{\bar{C}}$ suivant la direction x_i considérée.

En diagonalisant la matrice $\bar{\bar{M}}$, les valeurs propres λ_i et des vecteurs ψ_i apparaissent. La multiplication de l'équation 2.101 par ψ_i donne une nouvelle fonction W_i qui est définie telle que pour tout i on a :

$$dW_i = \psi_i d\bar{U} \quad (2.102)$$

L'équation 2.101 devient alors :

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} + \psi_i \frac{\partial W_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.103)$$

W_i sont définies comme des variables caractéristiques et s'écrivent de la manière suivante sur les frontières :

$$\begin{aligned}
 dW_1 &= dp - c^2 d\rho \\
 dW_2 &= dU.n_1 \\
 dW_3 &= dU.n_2 \\
 dW_4 &= dp + \tilde{\rho} c dU.n \\
 dW_5 &= dp - \tilde{\rho} c dU
 \end{aligned}
 \tag{2.104}$$

Les valeurs propres λ_i vérifient :

$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= \lambda_2 = \lambda_3 = U.n \\
 \lambda_4 &= U.n + c \\
 \lambda_5 &= U.n - c
 \end{aligned}
 \tag{2.105}$$

Le symbole \sim sur les lettres désigne une approximation de la valeur des variables correspondantes au pas de temps précédent.

Les conditions aux limites se calculent en 3 temps et ceci dans toutes les directions x_i . La première étape consiste à imposer des conditions aux limites de type Von Neumann (pente nulle) puis à chercher les variations temporelles de dW_i pour chaque variable caractéristique aux frontières. La seconde étape consiste à une correction des conditions limites. Ce dernier consiste à annuler les variations temporelles telles que :

$$\forall \lambda_i \langle 0, dW_i = 0 \tag{2.106}$$

Pour finir, la troisième étape consiste à résoudre le système 2.104 pour des solutions du types :

$$dp = p^{n+1} - p^n, dU = U^{n+1} - U^n, d\rho = \rho^{n+1} - \rho^n \tag{2.107}$$

Et de chercher toutes les variables au pas de temps $n+1$ sur les frontières.

De plus, une zone éponge est ajoutée aux conditions limites de non-réflexion pour assurer l'amortissement des fluctuations turbulentes. Cette dernière ajoute un terme source aux équations de Navier-Stokes dans une zone prédéfinie. Ce terme source est défini comme $\sigma(U - U_{ref})$. U_{ref} désigne l'état désirer pour l'écoulement en sortie. Dans le cadre de notre étude, il s'agit de l'état initial. De plus, $\sigma(x)$ est définie tel que :

$$\sigma(x) = \alpha \left(\frac{x - x_e}{x_f - x_e} \right)^\beta \quad (2.108)$$

Où le coefficient α et l'exposant β désignent des entiers fixés à chaque configuration de calcul, x_e l'abscisse du début de la zone éponge et x_f l'abscisse de la fin du domaine. La zone éponge s'étend sur 9 mailles avec $\alpha = 5$ et $\beta = 3$.

2.2.2.4 Résolution des équation des particules

2.2.2.4.1 Calcul de la position des particules

Il est à rappeler que les particules sont suivies par une approche lagrangienne ce qui présume que leur position ne correspond pas forcément à l'un des points du maillage. Or la vitesse, la température, la pression et la quantité de vapeur sont calculés aux nœuds du maillage. La première partie consiste à chercher la maille dans laquelle se situe la particule puis une interpolation des paramètres connus aux nœuds de la maille est faite. Pour rappel, l'équation à résoudre est :

$$\frac{dx_p}{dt} = u(x_p) \quad (2.109)$$

Où la vitesse de la particule est maintenant connue.

Pour résoudre cette équation, la méthode multipoints d'Adams-Bashforth d'ordre 6 est utilisée. Pour faciliter la lecture, la formule 1D de l'équation est utilisée :

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (2.110)$$

Il est à noter que la position x à un temps donné t_n , $x(t_n)$, s'écrit x^n au format indicielle. La position de la particule au temps $n + 1$ est calculée par :

$$x^{n+1} = x^n + \frac{\Delta t}{1440} (4277u^{n-1} - 7923u^{n-2} + 9982u^{n-3} - 7298u^{n-4} + 2877u^{n-5} - 475u^{n-6}) \quad (2.111)$$

Lors des premiers instants de calcul, il est nécessaire de dégrader le schéma, car il n'existe pas de valeurs antérieures

2.2.2.4.2 Résolution de l'équation de Fukuta-Walter

Pour résoudre l'équation de croissance des particules (équation 2.21), la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est utilisée. En utilisant l'équation 2.88, le schéma obtenue est ainsi formulé de la sorte :

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \Phi^n \\ \Phi_1 &= \Phi_0 + \gamma_1 \Delta t_p H_0 & H_0 &= H(\Phi_0) \\ \Phi_2 &= \Phi_1 + \gamma_2 \Delta t_p H_1 & H_1 &= H(\Phi_1) \\ \Phi_3 &= \Phi_2 + \gamma_3 \Delta t_p H_2 & H_2 &= H(\Phi_2) \\ \Phi_4 &= \Phi_3 + \gamma_4 \Delta t_p H_3 & H_3 &= H(\Phi_3) \\ \Phi^{n+1} &= \Phi_4 \end{aligned} \quad (2.112)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 1/6 \\ \gamma_2 &= 1/3 \\ \gamma_3 &= 1/3 \\ \gamma_4 &= 1/6 \end{aligned} \quad (2.113)$$

Il est à remarquer que la condition de stabilité du pas de temps (CFL) pour résoudre les équations de Navier-Stokes n'est pas respectée pour la résolution des particules. Pour cela, la limite de stabilité de la résolution de l'équation de Fukuta-Walter est donnée par :

$$\Delta t \leq \bar{r}^2 r_p^2 L_0 U_0 \left(\frac{A \frac{L^2 M_v \rho_p}{k_g R T_p^2 f_{3\alpha}} + \frac{R T_p \rho_p}{p_{sat} D_v M_v f_{3\beta}}}{|S - A|} \right) \quad (2.114)$$

Dans le cas où le pas de temps pour calculer la partie fluide ne respecte pas cette dernière condition, un pas de temps relatif aux particules est introduit tel que :

$$n \cdot \Delta t_p = \Delta t \quad (2.115)$$

Avec n entier et correspond au nombre de sous-itérations qu'il faut effectuer pour résoudre les équations relatives aux particules.

2.3 Parallélisation du code FLUDILES

2.3.1 Stratégie de parallélisation du code FLUDILES avec OpenMP

Le paragraphe 1.6.3 a introduit l'architectures à mémoire partagée et les outils de parallélisation adaptés pour le code FLUDILES. De ce fait, dans un premier temps, la première étape de la parallélisation de FLUDILES consiste à utiliser la bibliothèque de parallélisation OpenMP. Comme indiqué précédemment, OpenMP est une architecture conçue pour les machines à mémoire partagée. La stratégie de parallélisation du code FLUDILES en utilisant l'architecture OpenMP consiste à faire les étapes suivant :

- Exécuter un profilage du Code FLUDILES avec gprof (Graham et al., 1982) et VTune Amplifier Performance Profiler (Reinders, 2005).
- Trouver la boucle où le code en série passe le plus de temps d'exécution.

- Paralléliser cette dernière.
- Répéter la première étape.

Cette stratégie de parallélisation est appelée "*loop-level parallelization*" (Hoeflinger *et al.* (2001)). Après analyse des performances et du profilage, les fonctions et modules chronophages dans le code FLUDILES sont ceux responsables de la recherche des particules, de la dérivé centrée et des modules responsables des modèles de Smagorinsky. La seconde étape consiste à paralléliser les boucles se situant dans ces modules et fonctions. De ce fait, un exemple d'une région parallèle et d'une boucle parallélisée dans FLUDILES est décrit comme :

Extrait de code 2.1 Exemple d'une région parallèle dans FLUDILES

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO SCHEDULE( STATIC )
  do k=1,m3
    do j=1,m2
      do i=2,m1-1
        b(i,j,k)=(a(i+1,j,k)-a(i-1,j,k)) / (x(i+1)-x(i-1))
        b(m1,j,k)=(a(m1,j,k) - a(m1-1,j,k)) / (x(m1)-x(m1-1))
      enddo
    enddo
  enddo
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

Finalement, dans l'optique de faire une version parallèle de FLUDILES, il est important de savoir comment se comporte la version OpenMP. En effet, plusieurs stratégies sont possibles lorsqu'il s'agit d'utiliser les ressources de calcul avec une version distribuée, et au sein d'un nœud de calcul, il est possible de mettre un ou plusieurs processus utilisant la mémoire partagée. Il est donc important de savoir comment se comportent l'implémentation OpenMP en mémoire

partagée. Dans un premier temps, l'étude de l'accélération et de l'efficacité est faite. Puis, les résultats obtenus par la version OpenMP sont comparés avec la version séquentielle, qui elle a été déjà validée (voir Gago (2002), Maglaras (2007)).

2.3.1.1 Accélération et efficacité

La figure 2.1a montre comment se comporte le code FLUDILES avec l'implémentation OpenMP en faisant varier le nombre de CPUs entre 1 et 45. Le point positif est l'augmentation permanente de l'accélération avec le nombre de CPUs pour les cas considérés. L'accélération maximum avec l'implémentation OpenMP est de 4, c'est-à-dire que le temps d'exécution du code en parallèle avec OpenMP est 4 fois plus rapide que le temps d'exécution du code FLUDILES en séquentielle. Toutefois, l'usage d'un plus grand nombre de nœuds de calcul ne semble pas particulièrement avantageux. Ici, l'efficacité (figure 2.1b) diminue considérablement en augmentant le nombre de processeur, jusqu'à 10 % pour la variation OpenMP, pour les cas considérés. Cette performance est due principalement au trop grand nombre de communications entre les processeurs ainsi qu'à un déséquilibre de charge entre processeurs (charge de calcul et temps d'attente). Cela implique que des processeurs marchent à 100 % tandis que d'autres n'ont aucune charge de travail. Cependant, il est clair que dans certains cas, d'autres paramètres, hors de notre cadre de travail, influencent grandement l'efficacité du code FLUDILES.

Mais de telles performances ont permis de faire des calculs plus rapides, 1 jour au lieu d'une semaine pour le cas étudié, ici basé sur les calculs de Maglaras (2007), ce qui est plus que raisonnable pour des applications d'ingénierie ou fondamentales.

2.3.1.2 Comparaison entre les résultats OpenMP avec la version séquentielle

La validation de la parallélisation par OpenMP passe par la comparaison des résultats obtenus par la parallélisation avec ceux de la littérature. Pour cela, les études de Maglaras (2007) ainsi que ceux de Gago (2002) ont été choisis. Il s'agit ici d'une étude temporelle des premiers instants de vie de la formation de traînées de condensation. Pour cela, une simulation de jet chaud

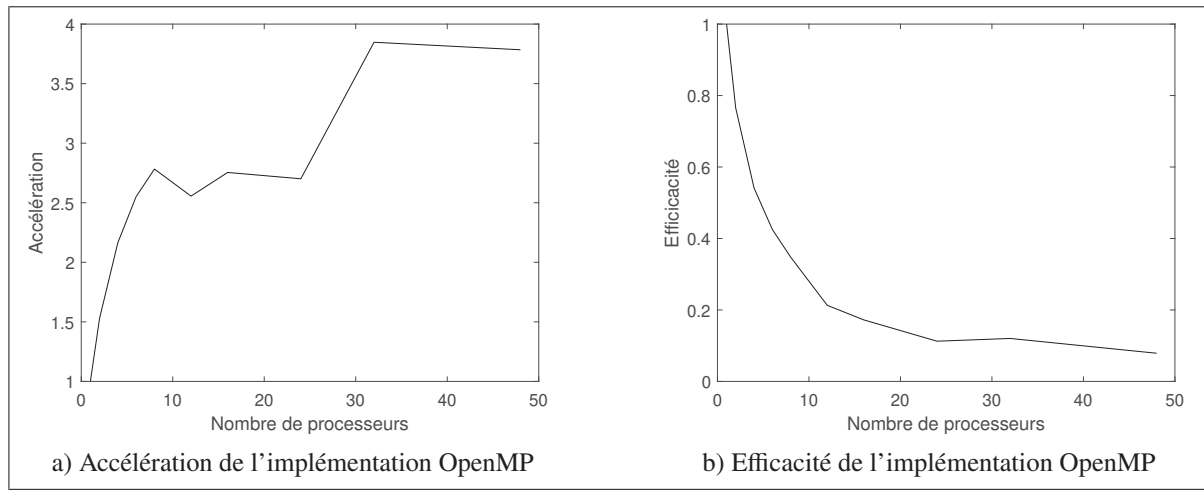


FIGURE 2.1 Accélération et efficacité de l'implémentation OpenMP

turbulent en sortie de moteur, utilisant des données relatives d'un moteur CFM56 en altitude de croisière, avec la formation de particule de glace est faite. Les résultats obtenus sont comparés sur la partie fluide et sur la partie croissance des particules. Il s'agit ici de faire une comparaison simple des résultats obtenus.

Dans un premier temps, la comparaison sur la partie fluide est faite sur la vitesse axiale moyenne adimensionnée (figure 2.2a), la température moyenne adimensionnée (figure 2.2b) et l'épaisseur de quantité de mouvement (figure 2.2c). Les résultats obtenus par le code parallélisé en OpenMP sont en accord avec ceux de la littérature que ce soit en termes de vitesse, température ou épaisseur de quantité de mouvement.

Dans un second temps, les résultats obtenus avec la parallélisation OpenMP sur la partie croissance des particules sont aussi en accord avec les résultats de la littérature. Du point de vue du nombre de particules saturé (figure 2.3a), de la saturation moyenne (figure 2.3b) et du rayon moyen (figure 2.3c), les résultats obtenus par le code parallélisé par OpenMP concordent avec ceux de Maglaras (2007). Cela est dû au fait que, lors du profilage, il a été vu que le code FLUDILES passe la grande majorité de son temps dans la partie fluide que dans la partie croissance et positionnement des particules.

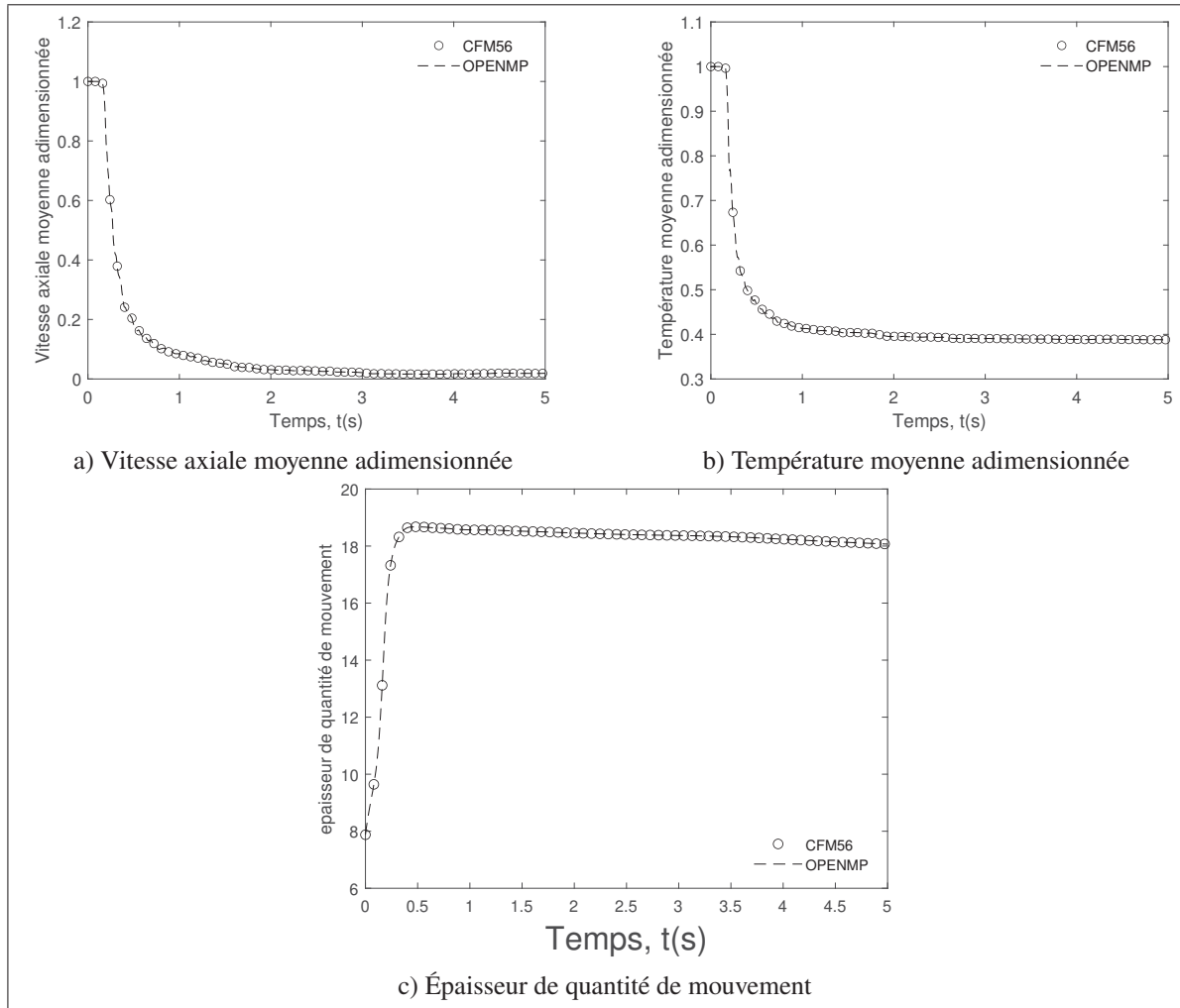


FIGURE 2.2 Validation de la phase gazeuse

Pour conclure, la parallélisation par la méthode OpenMP a montré un plus faible degré de difficulté à implémenter dans le code FLUDILES, ainsi qu'une bonne réversibilité ; ce dernier est facile à déboguer, mais il est difficile d'avoir une bonne accélération et une meilleure efficacité pour cette méthode de parallélisation. Les résultats obtenus par la méthode de parallélisation OpenMP sont en accord avec ceux de la littérature, ce qui indique le code parallélisé par la méthode OpenMP peut être utilisé pour la suite de l'étude. La parallélisation avec la bibliothèque MPI a été faite, mais nécessite encore des ajustements. Les premiers résultats montrent une meilleure performance que OpenMP (voir VI).

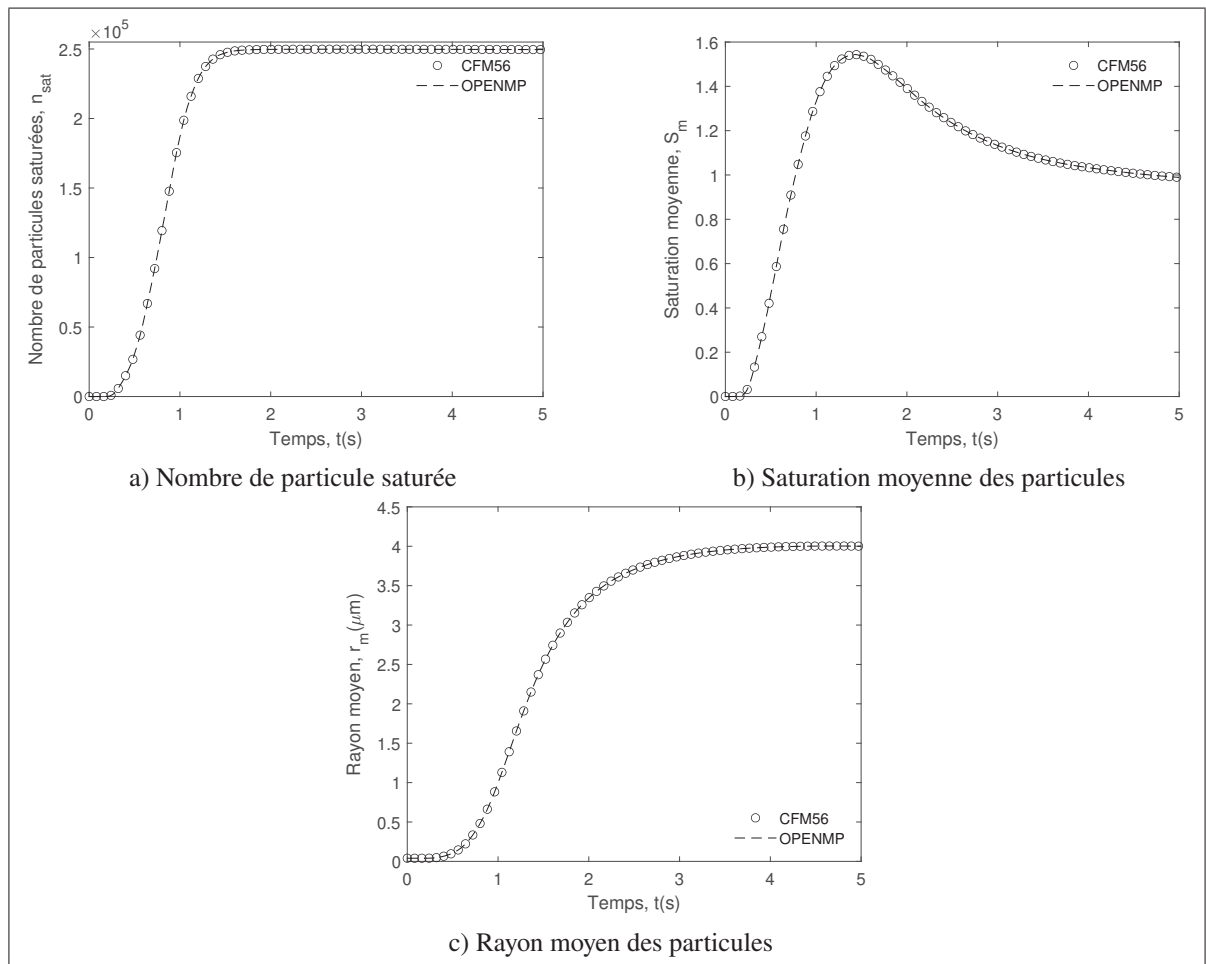


FIGURE 2.3 Validation de la phase dispersée

CHAPITRE 3

ÉTUDE D'UN JET SPATIAL TURBULENT POUR LA VALIDATION DE LA CONFIGURATION NUMÉRIQUE EN SIMULATION DES GRANDES ÉCHELLES

3.1 Introduction

Dans la plupart des études de la formation des traînées de condensation (Maglaras (2007)), la partie dynamique, i.e le jet turbulent en sortie de moteur, a été modélisée par la simulation des grandes échelles. Mais par souci de coût de calcul, le jet turbulent en sortie de moteur a été modélisé par une simulation temporelle. Néanmoins, avec l'augmentation constante de puissance des supercalculateurs, il est désormais possible de modéliser numériquement des écoulements de jet turbulent en spatiale. Ainsi, ce chapitre vise à répondre au premier sous-objectif de la thèse, à savoir, modéliser et valider un modèle numérique spatial en LES permettant de résoudre les grandes échelles de l'écoulement d'un jet turbulent. Pour cela, les étapes de modélisation et de validation du modèle LES spatial de l'écoulement du jet seront détaillées. Ce modèle LES permettra d'étudier la formation des traînées de condensation dans le chapitre 4.

L'étape de validation est primordiale, car elle consiste à déterminer si le modèle est une représentation précise du monde réel et si les résultats sont en accord avec les données expérimentales (Oberkampf & Trucano (2002)). Sur ce, l'étape de validation consiste à choisir un cas d'écoulement canonique dont la physique se rapproche le plus de notre cas d'application. Ici, les travaux de Hussein *et al.* (1994) ont été choisis. Ce cas canonique nous permettra de calibrer le modèle CFD et de valider le modèle de sous maille et le schéma de discrétisation. Les moyennes temporelles et instantanées pour le jet rond turbulent seront présentées. La seconde partie du chapitre consiste à identifier les structures turbulentes dans le champ de calcul ainsi que leurs interactions.

3.2 Description du montage expérimental de Hussein *et al.* (1994).

Pour l'initialisation et la validation des calculs, les résultats issus de l'expérience de Hussein *et al.* (1994) ont été pris. Le dispositif du jet a une longueur de 1,57 m comprenant à l'intérieur un nid d'abeille et un grillage. Les nids d'abeille servent à détruire les grosses structures présentes dans l'écoulement d'entrée du dispositif, et à diminuer le taux de turbulence dans l'écoulement en amont. Les grillages eux permettent d'homogénéiser l'écoulement (vitesse, et taux de turbulence) en imposant une baisse de pression statique qui est proportionnelle au carré de la vitesse, ce qui permet de diminuer l'épaisseur de la couche limite à la sortie du jet. La buse de sortie du jet a un diamètre interne de 1 pouce et elle est centrée par rapport à la surface de l'entrée de l'enceinte. Le jet en sortie de buse a une vitesse U_0 de $56,2 \text{ m.s}^{-1}$ (pour un nombre de Reynolds de 95000). L'intensité turbulente à la sortie est de 0,58 %.

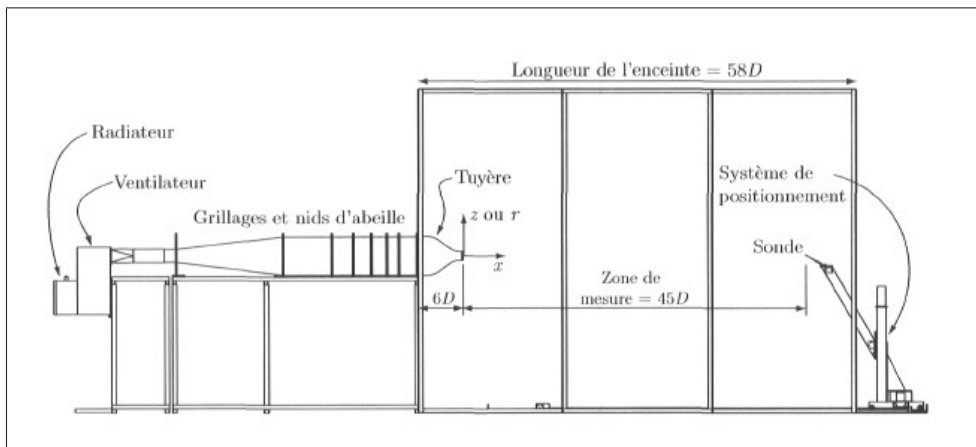


FIGURE 3.1 Représentation schématique du montage expérimental de Hussein *et al.* (1994)

Le jet évolue dans une large enceinte afin de minimiser l'influence de l'environnement extérieur sur l'écoulement. Cette enceinte a une forme rectangulaire de longueur 82 pieds (25 m) et de hauteur 16 pieds (4,8 m). Une représentation schématique de la configuration de l'écoulement est donnée sur la figure 3.1.

3.3 Configuration numérique du jet d'air turbulent

Il s'agit ici d'un jet rond turbulent en sortie de buse à un nombre de Reynolds de 95 000. Le nombre de Reynolds est basé sur le diamètre de la buse d'éjection et de la vitesse de sortie du jet turbulent. Le domaine de calcul est rectangulaire et est de $L_y = 72R$ de long ce qui permet d'atteindre la zone d'auto-similarité. Les plans transverses sont compris entre $x, z = -10,5R$ et $x, z = 10,5R$. Pour discrétiser ce domaine, le maillage est régulier dans les trois directions de l'espace, cela correspond à $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 0,15R$. Cette discrétisation de l'espace correspond à environ 10 millions de cellules. Ces tailles de mailles ont été prises en référence à Bogey & Bailly (2006c), Bogey & Bailly (2006d) et Tajallipour et al. (2013). Cette configuration du maillage permet d'avoir une bonne résolution dans le cœur visqueux du jet (10 points de maillage) ainsi qu'un CFL de 0,6. Le tableau 3.1 récapitule l'ensemble des paramètres de calcul basé sur l'expérience de Hussein *et al.* (1994).

TABLEAU 3.1 Paramètres des calculs

Diamètre du jet	$D=1$ pouce (0,0254 m)
Pression atmosphérique	$P_{at} = 1,01325 \times 10^5 Pa$
Nombre de Reynolds	$Re_j = 95000$
Longueur du domaine	$L_y = 72R$
Largeur du domaine	$L_x = L_z = 21R$
Taille de maille	$\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 0,15R$

Une représentation schématique de la configuration de l'écoulement est donnée par la figure 3.2.

L'écoulement du jet turbulent s'apparente à une couche de mélange axisymétrique entre deux courants de vitesses respectives U_j et U_0 . Un écoulement unidirectionnel, dont le profil correspond à la région du noyau potentiel, est pris en compte. Ce profil de vitesse est de type « chapeau haut de forme » et se rapproche d'une loi en tangente hyperbolique utilisée pour les

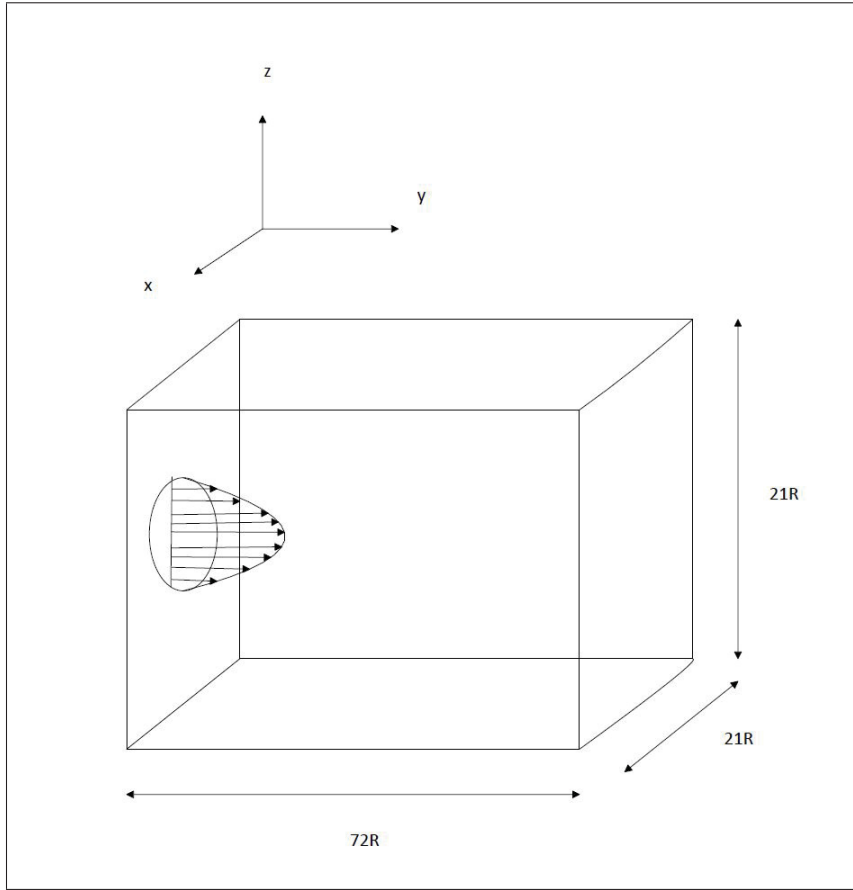


FIGURE 3.2 Représentation schématique de la configuration de l'écoulement

calculs de stabilité (Gago (2002), Bogey & Bailly (2006c), Maglaras (2007)).

$$U(r) = \frac{1}{2}(U_j + U_0) - \frac{1}{2}(U_j - U_0) \tanh\left(\frac{1}{4}\frac{R}{\theta}\left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r}\right)\right) \quad (3.1)$$

U_0 et U_j étant respectivement les vitesses à l'extérieur du jet et au centre du jet. θ désigne l'épaisseur de quantité de mouvement définie par :

$$\theta = \int_0^\infty \left(\frac{U - U_0}{U_j - U_0}\right) \left(1 - \frac{U - U_0}{U_j - U_0}\right) dr \quad (3.2)$$

θ représente la perte de quantité de mouvement par rapport au cas d'un écoulement de fluide parfait dans la même configuration. Enfin, dans le repère cartésien, r , est donné par la relation :

$$r = \sqrt{x^2 + z^2} \quad (3.3)$$

La présente étude est restreinte à une seule valeur du facteur de forme : $\frac{R}{\theta} = 10$. En effet, d'après Michalke & Hermann (1982), cette valeur correspond au profil le plus instable (i.e. pour lequel le taux d'amplification est le plus important). Afin d'amorcer le développement des phénomènes turbulents, des perturbations pseudo-aléatoires de faible amplitude sont ajoutées sur les composantes de vitesse, à l'initialisation, de sorte que :

$$u'_{x,z} = A \times f \times \left(\exp \left\{ - \left[\frac{1}{4} \frac{R}{\theta} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) \right]^2 \right\} \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

$$u'_y = A \times f \times \left(0.95 \exp \left\{ - \left[\frac{1}{4} \frac{R}{\theta} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r} \right) \right]^2 \right\} + 0.05 (1 - U(r)) \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

A représente l'amplitude des perturbations, ici fixée à 1%, et f est une fonction pseudo-aléatoire définie par le sous-programme *random_number* :

$$f = 2 \times \text{random_number} - 1 \quad (3.6)$$

f dépend de chaque point de l'espace et parcourt l'intervalle $[-1; 1]$.

Les résultats du jet d'air obtenus avec un maillage régulier sont présentés dans la section suivante et sont comparés à des résultats expérimentaux de Hussein *et al.* (1994).

3.4 Résultats

3.4.1 Similarité du jet d'air rond turbulent avec les résultats expérimentaux

La configuration numérique précédemment décrite est utilisée pour simuler un jet d'air turbulent dont les résultats sont comparés en termes de champs moyens, champs turbulents, de structure du jet et de transfert d'énergie entre les échelles turbulent à des résultats expérimentaux de jets d'air de Hussein *et al.* (1994) ainsi que numériques de Li *et al.* (2011c).

3.4.1.1 Conditions de convergence pour avoir un écoulement développé et stationnaire

Pour vérifier que l'écoulement étudié soit pleinement développé et statistiquement stationnaire, une étude de la convergence sur les tenseurs de Reynolds d'ordre 2 a été effectuée. La figure 3.3 présente la comparaison des tenseurs de Reynolds, selon l'axe de l'écoulement, pour différents temps. Les résultats montrent que dans un premier temps (0,6s) la valeur du tenseur de Reynolds est surévaluée. Puis, les résultats convergent vers les valeurs expérimentales. Il est à remarquer que les statistiques pour les temps suivants (5s et 6s) donnent approximativement les mêmes résultats. Ceci permet de dire que l'écoulement a atteint le régime pleinement développé et quasi stationnaire. Ainsi, 5s est le temps nécessaire pour parcourir une fois la longueur du domaine.

3.4.1.2 Champs moyens

La décroissance de la vitesse axiale moyenne sur l'axe du jet est représentée sur la figure 3.4. Les résultats obtenus sont comparés aux résultats expérimentaux de Hussein *et al.* (1994). Le profil du jet d'air numérique simulé présente une bonne correspondance avec celle de Hussein *et al.* (1994). L'écart entre les résultats numériques et expérimentaux est également observé par Lodato *et al.* (2009). Ces derniers imputent ses écarts aux modèles de sous-mailles utilisés, indiquant ainsi que le modèle utilisé ne prend pas en compte le transfert d'énergie des petites échelles vers les grandes.

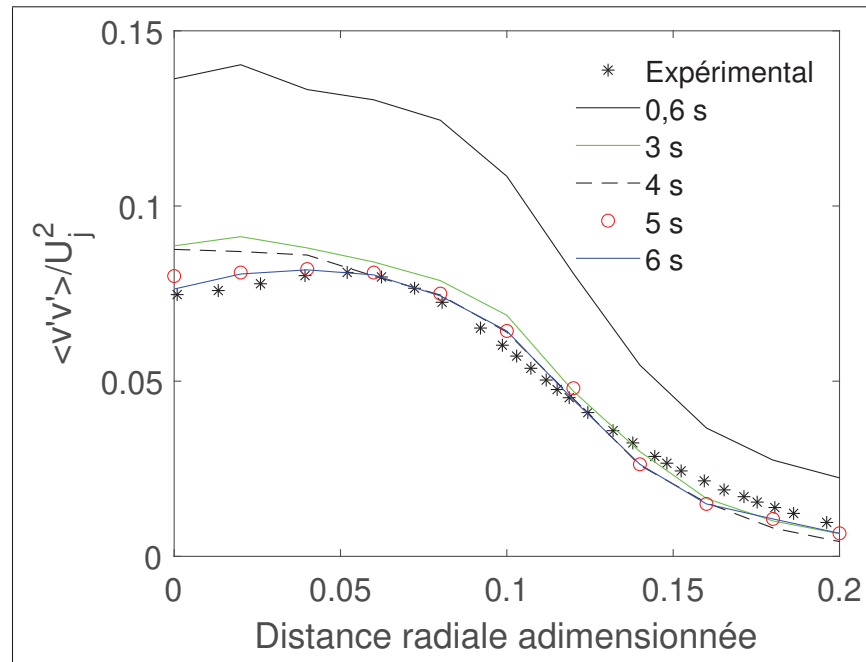


FIGURE 3.3 Comparaison des tenseurs de reynolds $\langle v'v' \rangle / U_0^2$ en fonction du temps

D'autre part, dans la région du cône potentiel, de l'ordre de $10D$ pour l'écoulement, la vitesse conserve sa valeur maximale initiale. Pendant la période de transition, elle chute rapidement. Enfin, alors que l'état de turbulence pleinement développée est atteint, une lente décroissance s'amorce. Il s'agit d'un comportement typique mentionné dans la littérature du jet (Gago (2002), Ball *et al.* (2012)).

Le profil de vitesse axiale moyenne adimensionnée par la vitesse centrale, U/U_o , est tracé en fonction de la coordonnée adimensionnée radiale, r , à une distance de $Y = 20D$, sur la figure 3.5. Cette distance axiale de $20D$ a été choisie afin d'étudier le comportement de la configuration numérique pour le jet rond turbulent soit dans la zone d'autosimilarité. Les résultats expérimentaux de Hussein *et al.* (1994) et numériques de Li *et al.* (2011c), fournissant les profils moyens pour un jet d'air rond turbulent dans la zone d'auto similarité, sont utilisés comme référence pour la comparaison des profils axiaux et radiaux. Les résultats obtenus par la simulation numérique sont en accord avec les données expérimentales loin en aval de la buse et sont quasiment superposés aux résultats de Hussein *et al.* (1994). Le champ moyen

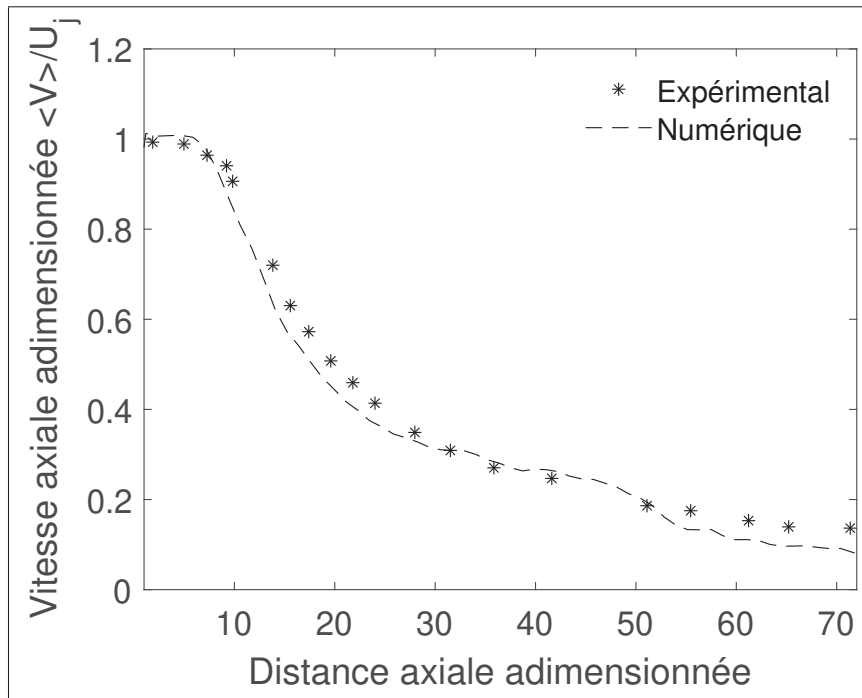


FIGURE 3.4 Décroissance axiale de la vitesse axiale adimensionnée. Résultats numérique et des données expérimentales de (Hussein *et al.* (1994))

de vitesse obtenu par la simulation des grandes échelles est donc en accord avec les données expérimentales pour une région se trouvant plus loin en aval du jet.

3.4.1.3 Champs turbulents

Pour approfondir la validation de la simulation numérique choisie, les tenseurs de Reynolds d'ordre deux du champ de vitesse sont présentés sur la figure 3.6 et sont comparés aux résultats expérimentaux de Hussein *et al.* (1994) et numériques de Li *et al.* (2011c). La turbulence commence à se développer dans la couche de mélange entre le jet et le milieu ambiant, puis l'écoulement devient pleinement turbulent. Les résultats obtenus sur la fluctuation turbulente suivent les tendances montrées dans la littérature (Gago (2002), White & Corfield (1991)). En effet, l'intensité turbulente axiale adimensionnée, ici $\langle v'v' \rangle$, est supérieure à l'intensité turbulente transverse $\langle u'u' \rangle$. Cela est dû au fait que les grandes structures de l'écoulement ont une direction préférentielle, celle de l'écoulement, et parce que le champ de turbulence ne peut

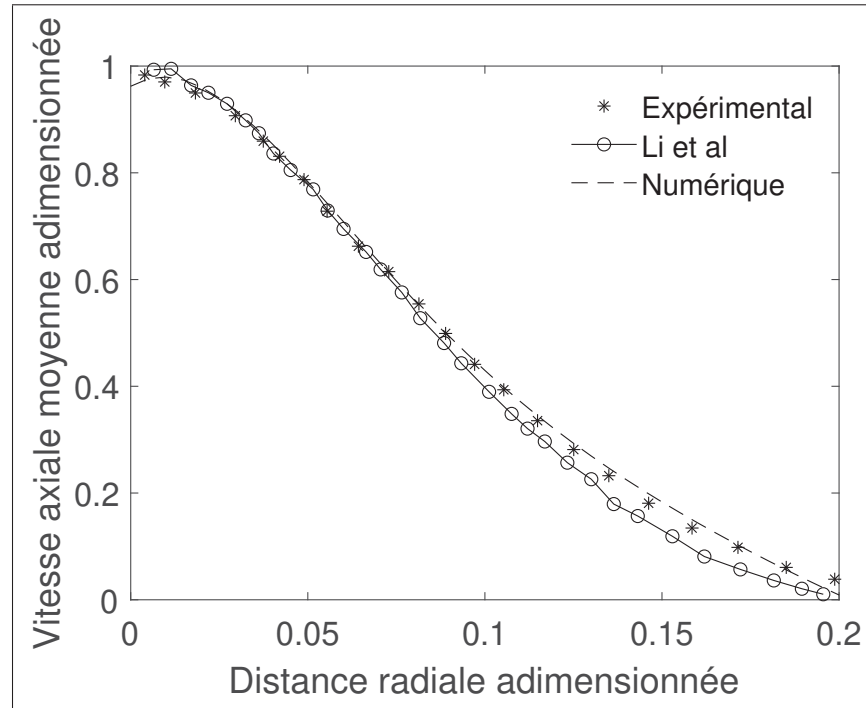


FIGURE 3.5 Décroissance radiale de la vitesse axiale adimensionnée dans la zone d'auto-similarité. Résultats numérique et de la littérature (Hussein *et al.* (1994) et Li *et al.* (2011c))

être supposé isotrope dans cette région. Il est à noté que $\langle u'u' \rangle$ et $\langle w'w' \rangle$ sont similaire pour l'écoulement.

Pour la validation des tenseurs de Reynolds, les résultats de la simulation sont en bon accord avec les données expérimentales (Hussein *et al.* (1994)) en termes de valeur maximale et d'ordre de grandeur, bien qu'il existe encore quelques différences, comme la figure 3.6a pour la contrainte de Reynolds $\langle v'v' \rangle$, et sur la figure 3.6d pour la contrainte de Reynolds $\langle u'_r u'_r \rangle$. La différence peut être directement liée aux conditions aux limites et initiales de l'écoulement utilisées dans la simulation LES. Le choix d'un schéma d'ordre 6 pour résoudre les termes convectifs dans l'équation de Navier-Stokes entraîne l'utilisation d'un limiteur numérique en plus (dû à la présence de forte oscillation numérique au début du calcul, annexe V). L'effet du limiteur consiste à une faible accumulation d'énergie au niveau des petites échelles (Gago, 2002). Ainsi, ce limiteur numérique a une influence sur les résultats obtenus aux débuts du

calcul et peut expliquer la différence observée entre les résultats obtenus et ceux de la revue de littérature. De même, ces différences ont aussi été remarquées par Lodato *et al.* (2009). Ils ont aussi imputé ce dernier sur le choix du modèle de sous-maille. Ils indiquent que les modèles choisis ne prennent pas en compte le retour d'énergie, ce qui entraîne un modèle plus dissipatif.

Cette dernière conclusion, ainsi que la comparaison satisfaisante entre les résultats numériques et expérimentaux pour les tenseurs de Reynolds de second ordre, montre la capacité de la configuration numérique à modéliser le jet d'air turbulent. Afin de confirmer ces conclusions, l'analyse du spectre d'énergie cinétique turbulent du jet d'air turbulent est présentée dans la section suivante.

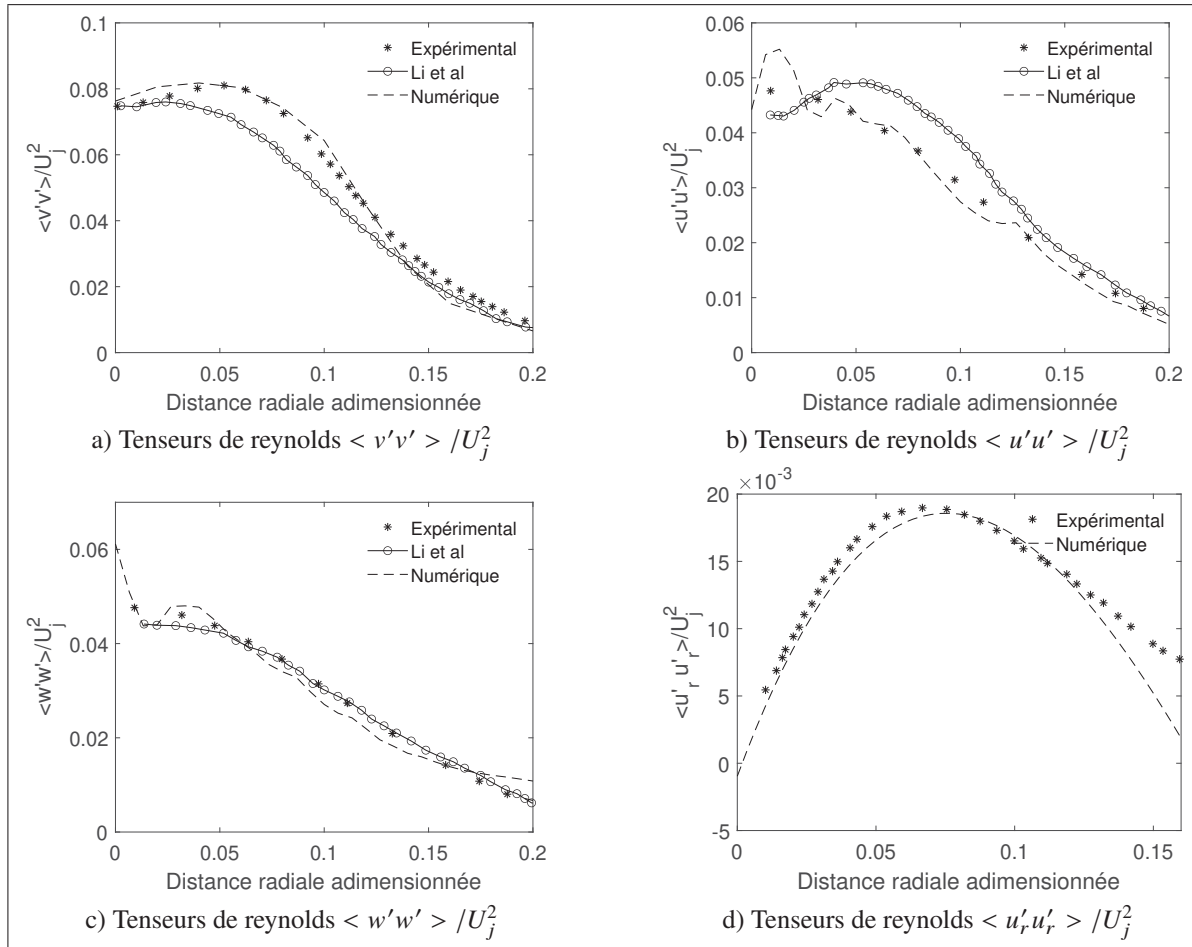


FIGURE 3.6 Tenseurs de Reynolds d'ordre deux adimensionnées

3.4.1.4 Étude du spectre d'énergie cinétique turbulente

Les résultats numériques sur le champ moyen et turbulent ont montré un accord quantitatif avec les données expérimentales de Hussein *et al.* (1994). Pour approfondir l'étude sur l'écoulement du jet d'air turbulent et sa validation, le processus de transfert d'énergie au sein de l'écoulement est étudié. Dans ce cas, le spectre d'énergie cinétique turbulente de la vitesse axiale sur l'axe à 30D est calculé (figure 3.7). Ce dernier est calculé afin de vérifier le transfert d'énergie des grandes aux petites échelles de l'écoulement. Ce transfert d'énergie est la partie importante dans le cadre de la simulation des grandes échelles. La méthode utilisée pour le calcul du spectre d'énergie est la méthode Welch (Welch (1967)). Cette méthode consiste à diviser le signal temporel en blocs successifs, en formant des périodogrammes pour chaque bloc et en faisant la moyenne de ces derniers. Ce principe nécessite un calcul en amont d'une série temporelle de la vitesse axiale en un point.

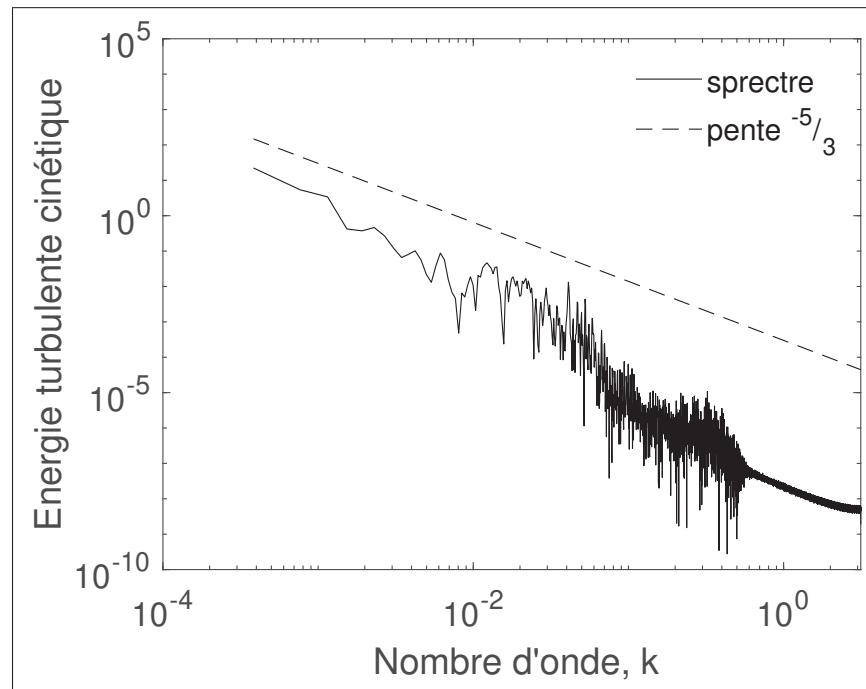


FIGURE 3.7 Spectre d'énergie cinétique turbulente

La forme des spectres d'énergie cinétique turbulente (Figure 3.7) montre que la cascade d'énergie de Kolmogorov est vérifiée dans la première partie du spectre, entre les grandes échelles et les échelles inertielles. La turbulence étant pleinement développée aux temps considérés, la pente en $-5/3$ est retrouvée pour les moyennes et grandes échelles, conformément à la théorie de Kolmogorov. Le transfert d'énergie se poursuit ensuite aux plus petites échelles avec une pente plus importante. Cependant, lors de la transition vers les plus petites échelles, la pente remonte faiblement. Il est ainsi difficile de conclure sur l'exactitude du transfert d'énergie vers les plus petites échelles. Ceci est dû probablement au maillage choisi (maillage pas assez fin).

Ces résultats sur le transfert d'énergie ainsi que les résultats obtenus pour les profils moyens et turbulents ont permis de valider la configuration numérique de la résolution de la phase eulérienne d'un jet d'air turbulent en sortie de moteur d'avion.

3.4.2 Structure du jet turbulent

L'analyse quantitative des champs moyens et turbulents a montré une corrélation satisfaisante avec les résultats de la littérature pour le jet d'air turbulent. Ainsi, une étude qualitative des champs et structures turbulents est menée afin de continuer la validation du modèle spatiale du jet rond turbulent. La figure 3.8 présente le champ de la norme de la vitesse dans le plan médian. La présence d'un cône potentiel est observée comme attendu pour un jet turbulent (White & Corfield (1991)). Par la suite, la vitesse décroît en s'éloignant du cône potentiel. Ces résultats correspondent à ceux trouvés à la section précédente. La figure 3.9 présente la norme de la vortacité adimensionnée dans le domaine de calcul. La figure 3.9 montre toutes les structures cohérentes de vortacité à petite échelle. Ces structures cohérentes instantanées proviennent des instabilités de Kelvin-Helmholtz et elles sont moins organisées et persistantes pendant de courtes périodes en raison des processus successifs d'accélération et de décélération. Ces instabilités sont quasi inexistantes au début du jet. Puis, dans la zone de transition, des anneaux de vortacité se forment dans la périphérie du jet. Par la suite, un mécanisme de fractionnement des structures de la turbulence apparaît. À la fin du domaine de calcul, le jet présente le comportement d'un jet pleinement turbulent. Ce développement d'instabilité, ainsi que le mécanisme de déclin

en turbulence à petite échelle, a également été montré par d'autres auteurs (White & Corfield (1991)). Il faut remarquer que la transition vers le régime turbulent (la croissance des modes instables et la formation des structures tourbillonnaire) s'effectue au début du calcul étant donné le nombre de Reynolds élevé.

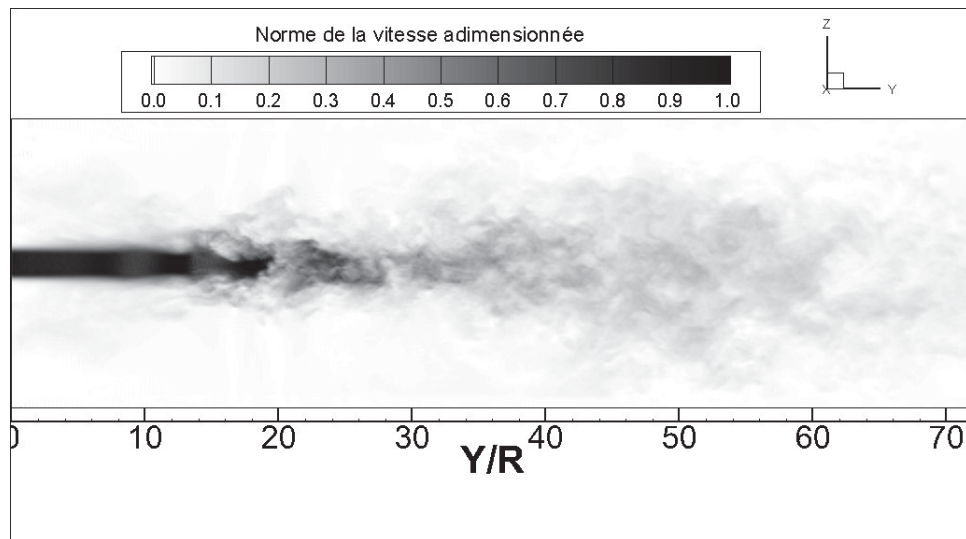


FIGURE 3.8 Champs instantané de la vitesse adimensionnée dans le domaine de calcul à $t=5$ s

La topologie de l'écoulement du jet turbulent pendant sa transition vers un état de turbulence pleinement développé est montrée à la figure 3.10. Pour la visualisation, une surface isobare est représentée en bleu et une isodensité en rouge. Les surfaces de pression montrent le développement des perturbations, tandis que les surfaces de densité définissent une interface entre le jet et l'écoulement externe. Dans un premier temps, au début du jet, le champ de densité n'est pas encore déstabilisé et les structures de pression se présentent sous forme d'anneaux qui s'enroulent autour de la surface de densité. Ensuite, la surface d'iso-densité commence à se déstabiliser tandis que les structures de pression continuent de s'enrouler autour de la surface de densité. Ce comportement caractérise le régime transitoire. Puis, l'écoulement devient turbulent et les surfaces de densité et de pression se fragmentent. Ce comportement est en accord avec le comportement d'un jet rond turbulent (Gago (2002)).

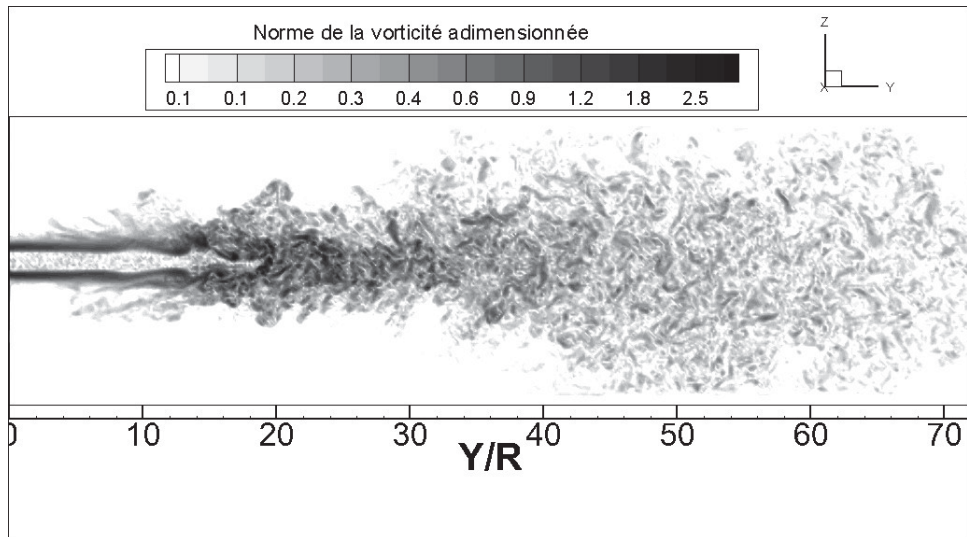


FIGURE 3.9 Champs instantané de vorticité adimensionnée dans le domaine de calcul à $t=5$ s

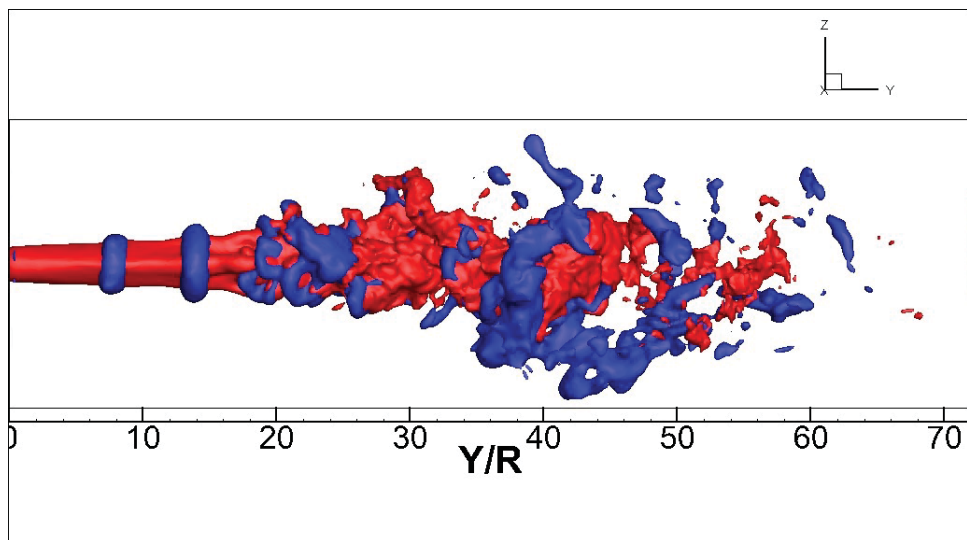


FIGURE 3.10 Iso-surface de pression (bleu) et de masse volumique (rouge) à $t=5$ s

3.4.3 Structure cohérente dans le jet turbulent

Le terme « structure cohérente » désigne une zone de l'écoulement dont les particules fluides ont une dynamique de vorticité similaire (ou cohérente). Dans la littérature, plusieurs critères

d'identification existent pour la détection de vortex dans un écoulement turbulent. Une partie de ces critères d'identification utilisent les propriétés géométriques de l'écoulement comme l'enroulement des vecteurs vitesse, d'autres utilisent les propriétés physiques tels que la pression, l'instabilité et la dissipation. Pour cette étude, deux d'entre eux ont été choisis , le premier est le critère Q qui se base sur le tenseur de gradient de vitesse et le critère lambda 2 (λ_2) qui se base sur les minima de pression (Fiabane (2013)).

Le critère Q est basé sur le deuxième invariant du gradient de vitesse ∇u . Cela implique que Q est défini sur les parties symétriques Ω_{ij} et antisymétriques S_{ij} du tenseur gradient de vitesse. Les tenseurs des taux de déformations et de rotations s'écrivent :

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.7)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.8)$$

On peut alors définir le critère Q comme :

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \quad (3.9)$$

Le critère Q évalue l'équilibre entre une rotation solide et une déformation pure.

Le critère λ_2 consiste à chercher les valeurs propres du tenseur symétrique $\Omega_{ij}^2 + S_{ij}^2$. Les zones où les valeurs propres sont négatives ($\lambda_2 < 0$) correspondent à des régions à pression minimale locale due au mouvement tourbillonnaire. Le centre de tourbillon est identifié par l'extremum de la fonction λ_2 .

La figure 3.11 représente l'application de ces critères sur le champ de vitesse de l'écoulement du jet turbulent à différent temps dans le domaine de calcul. Pour la visualisation des structures

cohérentes, les valeurs dimensionnelles du critère Q sont donc prises à un seuil assez faible (proche de 0) pour pouvoir capter les structures tourbillonnaires dans leur ensemble. Le critère λ_2 est pris entre -1 et 1, ce qui permet d'identifier les tourbillons contrarotatifs. Ces valeurs utilisées correspondent aux valeurs utilisées pour l'identification des structures cohérentes dans la littérature (Fiabane (2013)).

La figure 3.11a et 3.11b présentent le début de la formation du jet. La visualisation du critère Q montre la formation d'anneau en amont du noyau du jet. Ces structures annulaires sont communément appelées anneaux de vorticit  et sont  galement pr sentes dans les figures 3.11c et 3.11e. Ces anneaux de vorticit  sont cr  s par les instabilit s de Kelvin-Helmoltz pr sentes dans la couche de cisaillement entre le jet turbulent et le milieu ext rieur, initialement au repos (Yule (1978)). Ce comportement a  t  constat  par Sbrizzai et al. (2004b) et Li et al. (2011b) lors de simulations de jet rond turbulent. En parall le, la figure 3.11b montre la visualisation du crit re λ_2 . Dans ce cas, les tourbillons dans lesquels l'enroulement (rotation) prend le pas sur la dissipation d' nergie (d formation pure) seront associ s   un crit re λ_2 n gatif. De plus, une valeur n gative du crit re λ_2 entra ne la pr sence d'un noyau de vorticit  (Jeong & Hussain (1995)). Ainsi, la visualisation du crit re λ_2 , dans les premiers instants de vie du jet, montre la pr sence de tourbillon plus intense   l'int rieur du jet qu'  sa p riph rie.

  1,5 seconde, les remarques faites pr c demment s'appliquent toujours au jet turbulent. L'anneau de vorticit  est pr sent   l'extr mit  du noyau potentielle du jet. Le crit re Q (figure 3.11c) illustre la complexification de l' coulement. Dans la zone de transition, les structures coh rentes pr c demment pr sent es sont remplac es par des tourbillons tridimensionnels non coh rents. Ces structures tridimensionnelles caract risent la turbulence d'un jet dans la litt rature (Yule (1978)). Enfin, dans la zone de transition, de petites structures tourbillonnaires sont remarqu es par le crit re λ_2 .

La complexification de la structure de l' coulement se confirme   2 secondes (figure 3.11f). L'anneau de vorticit  pr sent   la fin du noyau potentiel se d forme et se fragmente. En aval du jet, la formation de ligament indique que l' coulement devient plus turbulent dans cette r gion.

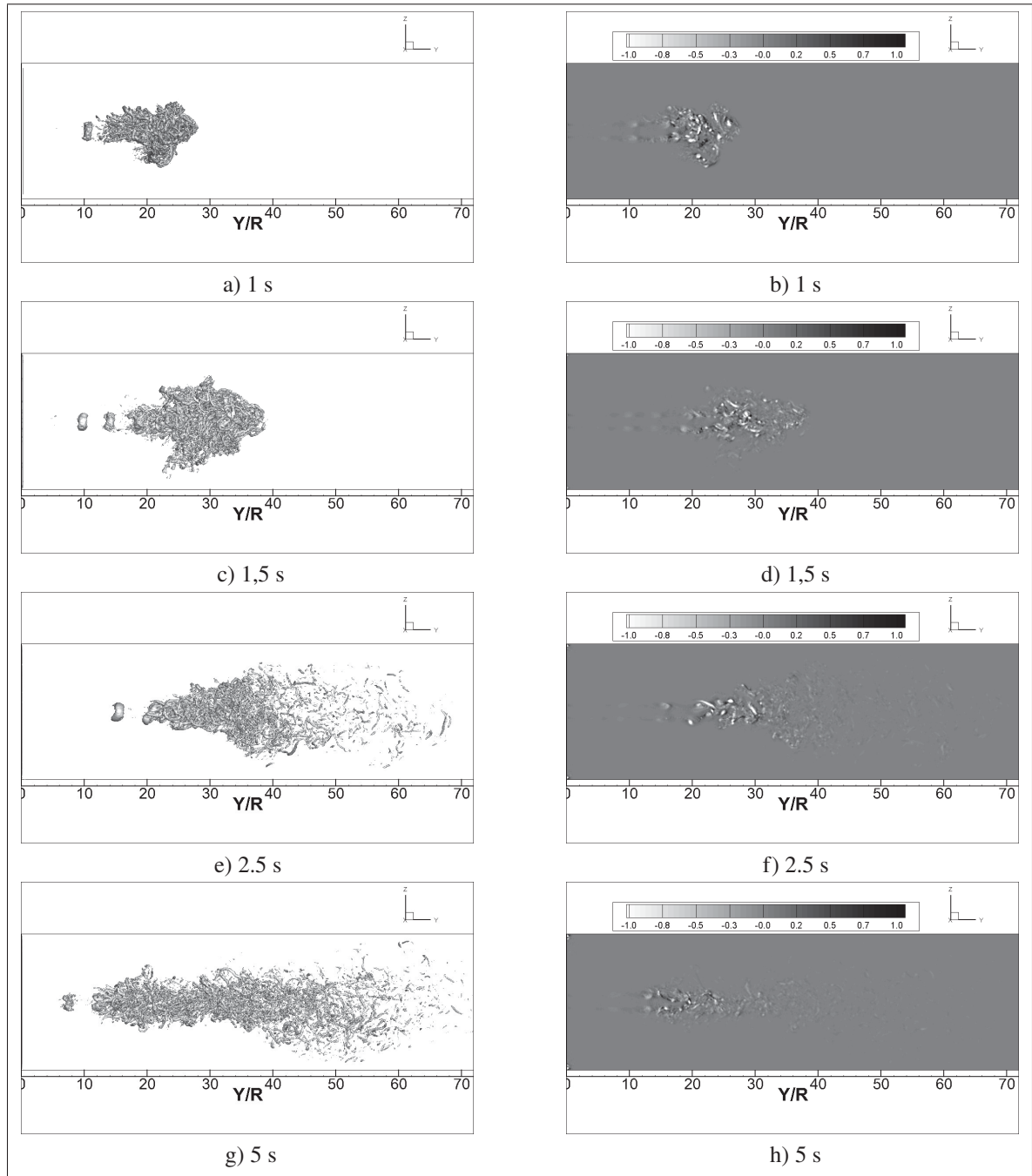


FIGURE 3.11 Iso-surface du critère Q et scalaire du critère Λ_2 entre 1 et 5 s

Il est à remarquer que ces structures tridimensionnelles, appelées ligament (Ball *et al.* (2012)), illustrées précédemment, se fragmentent en de plus petites structures tourbillonnaires. De même, le critère λ_2 montre que les tourbillons de forte intensité se situent toujours à l'intérieur du jet.

À la fin du calcul, en gardant le même critère de visualisation pour le critère Q , l'anneau de vorticit   s'est dissip  , ce qui indique que les structures cessent d'  tre g  n  r  es    la sortie du jet. Dans la zone de transition, les structures se fragmentent en ligaments de plus petites tailles au cours du temps. Ceci indique que le transfert d'  nergie ne se fait que vers les petites structures turbulentes.

En somme, le crit  re Q et λ_2 ont permis de valider qualitativement les structures pr  sentes dans le jet turbulent. De plus, ces crit  res ont permis de d  tecter les structures de recirculation et les anneaux tourbillonnaires caract  ristiques au jet turbulent. De m  me, les deux crit  res ont permis de d  terminer les structures plus fines existant dans l'  coulement.

3.5 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, le premier sous-objectif consistait    valider la capacit   du code FLUDILES    mod  liser un jet spatial turbulent par la simulation des grandes   chelles. Ce processus de validation a   t   fait en prenant un cas canonique de la litt  rature (Hussein *et al.* (1994)). Pour cela, il a   t   propos   de mod  liser un jet d'air turbulent    haut nombre de Reynolds. La configuration du calcul num  rique a   t   pr  sent  e dans un premier temps.

Ensuite, les r  sultats obtenus par la simulation num  rique du jet d'air turbulent ont   t   compar  s aux donn  es exp  rimentales de Hussein *et al.* (1994), en termes de moyenne, de tenseurs turbulence du second ordre ainsi que de transfert d'  nergie entre les   chelles. Les profils de la vitesse moyenne ont montr   une bonne correspondance avec les r  sultats exp  rimentaux. Les moments de second ordre ont aussi montr   de bons accords. Ensuite, l'  valuation de la qualit   de la r  solution par le calcul du spectre d'  nergie cin  tique turbulente de la vitesse axiale a montr   la similarit   avec la cascade d'  nergie de Kolmogorov pour une partie des   chelles turbulente. Ceci a permis de conclure la premi  re partie de validation quantitative de la simulation num  rique.

Par la suite, une validation qualitative a   t   r  alis  e par le moyen de champ de vitesse, de vorticit   et des isosurfaces de pression et de densit  . Les r  sultats ont montr   les caract  ristiques du jet

rond turbulent. Une étude approfondie de ces structures par le biais du critère Q et λ_2 a illustré la capacité du code FLUDILES à simuler un jet spatial turbulent par la présence d'anneau de vorticité et de ligament tourbillonnaire dans le jet, similaire à ce que l'on observe dans la littérature.

La validation étant une étape importante pour une simulation numérique, ce chapitre a donc permis d'atteindre cet objectif. La configuration numérique pour les simulations peut être utilisée afin de mieux comprendre le mécanisme de la formation des traînées de condensation dans le jet propulsif.

CHAPITRE 4

ÉTUDES DE LA FORMATION DES TRAÎNÉES DE CONDENSATION À LA SORTIE DU MOTEUR CFM56

4.1 Introduction

Le chapitre précédent a mis en évidence la capacité du code FLUDILES à modéliser un jet spatial turbulent en simulation des grandes échelles. La revue de littérature a montré l'impact du jet turbulent en sortie de moteur sur la formation des traînées de condensation. Cette dynamique influence l'ensemble des propriétés des particules à savoir leur nombre, leur taille, la vitesse à laquelle elles se forment, leur concentration ainsi que l'épaisseur optique. Il est donc primordial d'utiliser les paramètres d'un écoulement d'un jet turbulent en sortie de moteur pour étudier la formation des traînées de condensation. Ainsi, le présent chapitre a pour but de répondre au second sous-objectif de la thèse, à savoir, l'étude de la formation des traînées de condensation en prenant en compte les données relatives au vol d'un A340 équipé de moteurs CFM56 en altitude de croisière.

Dans ce chapitre, l'approche retenue pour modéliser la formation des traînées de condensation consiste à décrire la dynamique de l'écoulement dans le champ de l'avion proche de manière détaillée; la phase gazeuse est résolue par la simulation des grandes échelles tandis que les particules sont traquées par la méthode lagrangienne. Le jet turbulent en sortie de moteur est ensuite couplé à un modèle microphysique prenant en compte le changement de masse des particules de glaces ainsi que l'évolution de leur rayon. Cette approche ne prend pas en compte les réactions chimiques. Une analyse est ensuite réalisée pour mieux comprendre l'effet de la turbulence du jet en sortie de moteur sur la formation des particules de glace.

4.2 Configuration numérique du jet d'air turbulent et des particules en sortie de moteur

Pour cette étude, le domaine de calcul ainsi que le maillage et les profils de vitesse sont réutilisés et sont décrits en détail dans la partie 3.3. Ce domaine de calcul a été utilisé pour

la validation de la partie dynamique du jet turbulent. Afin d'y ajouter l'interaction avec les processus microphysiques, des conditions initiales et aux limites favorables à la formation de traînée de condensation sont utilisées. Pour cela, des paramètres d'un écoulement réaliste sont utilisés en implémentant des données relatives au vol d'un A340 équipé de moteurs CFM56 en altitude de croisière. La pression ambiante et la température ambiante sont fixées aux valeurs données par les propriétés standards de l'atmosphère à une altitude de croisière (11 km), soit $P = 24000$ Pa et $T = 220$ K. À partir des données du moteur, la vitesse du jet en sortie de moteur et le nombre de Reynolds associé sont calculés. Ils sont respectivement de $U_j = 482.80 m.s^{-1}$ et $Re_j = 5.5 \times 10^5$. Il est rappelé que pour limiter le coûts de calcul, des particules numériques sont considérées, chacune d'entre elles représentant un paquet de n_{trans} particules physiques (1 particule numérique équivaut à 10^7 particules physiques). Ces dernières sont placées de façon aléatoire à la sortie de la buse. Ces paramètres de calcul sont résumés dans le tableau 4.1.

TABLEAU 4.1 Paramètres des calculs pour un moteur A340-300 (Maglaras (2007))

Rayon du jet	$R = 0.5$ m
Température du jet	$T_j = 580K$
Température ambiante	$T_\infty(K) = 220$ K
Vitesse du jet en sortie de moteur	$U_j = 482.80 m.s^{-1}$
Nombre de Reynolds	$Re_j = 5.5 \times 10^5$
fraction molaire de la vapeur pour le jet	$X_{(H_2O)_{v-jet}} = 3.10^{-2}$
fraction molaire de la vapeur ambiante	$X_{(H_2O)_{v-\infty}} = 10^{-5}$
Pression atmosphérique	$P_\infty = 24000$ Pa
Nombre de particules numériques	$N_p = 250000$
Rayon initial des particules de suies	$r_{p,0} = 20.10^{-9}$ m

Le profil initial de température est donné par la relation de Crocco-Busemann (Candel & Barrère (1990)).

$$T(r) = T_j \left(\frac{U}{U_j} + \frac{T_0}{T_j} \left(1 - \frac{U}{U_j} \right) + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \times \frac{U}{U_j} \left(1 - \frac{U}{U_j} \right) \right) \quad (4.1)$$

T_0 et T_j étant respectivement les températures à l'extérieur et au centre du jet.

Pour initialiser les calculs, la densité de suies en sortie de tuyère est donnée par (Vancassel (2003)) :

$$n = \frac{EIP_{soot} \cdot \rho_j}{AFR + 1} \quad (4.2)$$

Avec EIP_{soot} entre 10^4 et 10^5 \#/kg de fuel consommé d'après le rapport de l'IPCC (Ellis et al. (1999)) et l'Air to Fuel Ratio (AFR) est fixé à 60 en vol de croisière (Garnier et al. (1997b)). La concentration initiale des particules est donc de $n = 10^{12} \text{ \#.m}^{-3}$. De plus, la teneur en eau du jet est donnée par :

$$X_{(H_2O)_{v-jet}} = \frac{EI_v}{AFR + 1} \cdot \frac{M_v}{M_a} \quad (4.3)$$

Avec $EI_v = 1,26 \text{ kg/kg}$ fuel consommé (Vancassel (2003)) et M_a la masse molaire de l'air et M_v la masse molaire de l'eau.

4.3 Résultats

La configuration numérique précédemment décrite est utilisée pour simuler un jet d'air chaud turbulent en sortie de moteur mixé avec des particules de suie. Cette configuration permet de simuler numériquement la formation des traînées de condensation. Dans le cadre de la modélisation de la formation des traînées de condensation, la vapeur d'eau contenue dans le moteur se condense sur la surface activée des particules de suies se trouvant dans des zones de sursaturation en eau liquide.

4.3.1 Dynamique du transport des particules de suies dans le jet turbulent sans modèle microphysique.

La première partie de l'étude consiste à examiner le comportement des particules de suie dans le jet turbulent. Cette étude a pour but d'analyser leur réponse par rapport aux différentes

échelles turbulentes créées par le jet et de valider leur comportement en tant que traceur passif dans l'écoulement. Il est important de remarquer que pour cette première étude, le modèle microphysique n'est pas pris en compte. Ici, on se concentre principalement sur le comportement général de toutes les particules (suie et cristaux de glaces) et de leur transport dans l'écoulement du jet turbulent.

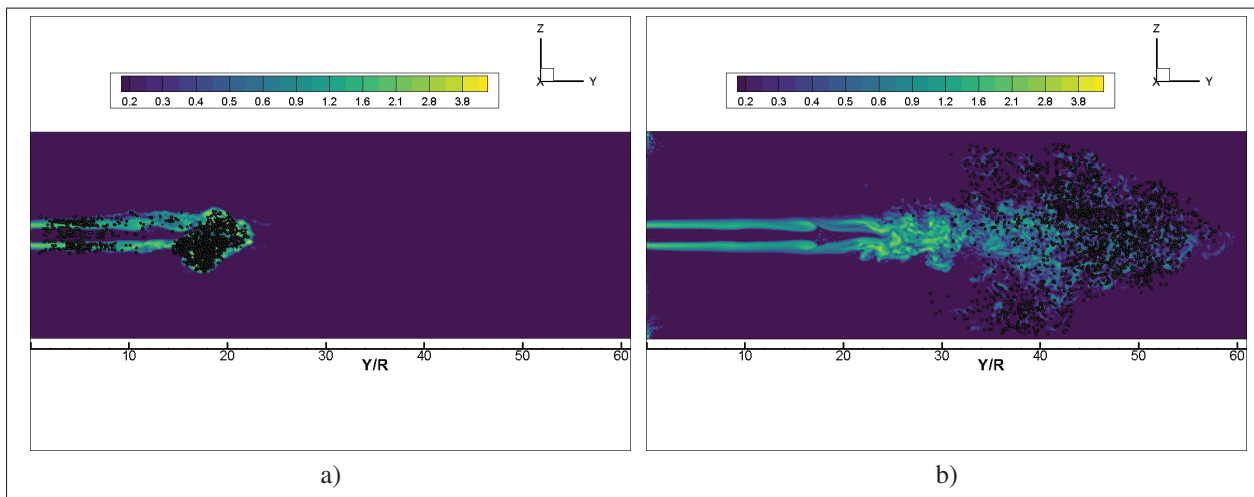


FIGURE 4.1   volution des particules (points noirs)   diff rent temps dans le champs de vorticit  : (a) $t = 0.5$ s, (b) $t = 2$ s

La figure 4.1 montre l' volution des particules de suies dans le jet (ici le champ scalaire de vorticit )   des temps diff rents. Ainsi, dans la r gion du c ur du jet allant de 0 d   6 d, les particules sont positionn es dans la r gion proche de l'axe, car le jet n'est pas encore d velopp . Dans la zone de transition, les particules sont entra n es dans le flux par les anneaux de vorticit  comme indiqu  sur la figure 4.2. Ce comportement a  galement  t  observ  par Sbrizzai, Verzicco, Pidria & Soldati (2004a) dans la zone de transition du jet rond. Par la suite, les particules ont tendance   suivre le mouvement du fluide (4.1b) ce qui est attendu comme comportement pour des particules de tr s petites tailles qui agissent comme un traceur passif.

La figure 4.3 montre l' volution des particules de suies dans le jet avec le crit re Q . L'analyse montre que la dispersion des particules est domin e par les grandes structures turbulentes de l' coulement, ce qui est confirm  par les  tudes de Li et al. (2011a) et Sbrizzai *et al.* (2004a).

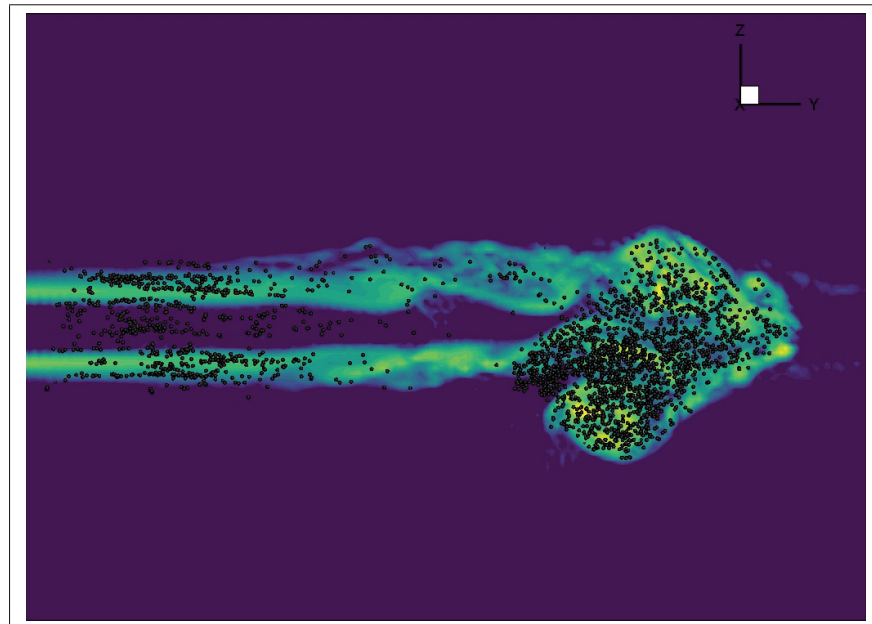


FIGURE 4.2 Zoom de l'évolution des particules dans le champs de vorticité à $t = 0.5$ s

Cela montre que les particules n'ont aucune influence sur l'écoulement du jet turbulent en sortie du moteur.

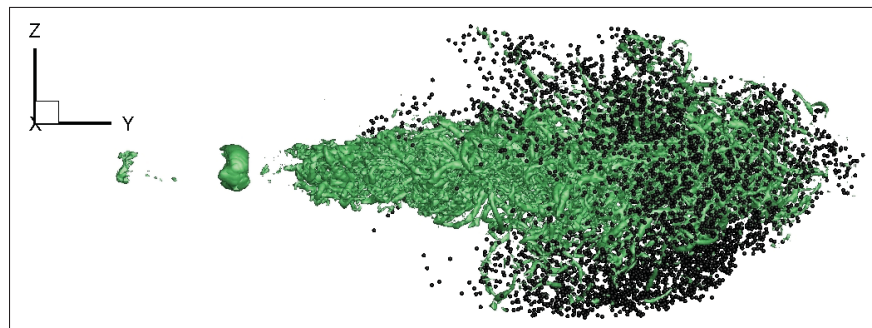


FIGURE 4.3 Évolution des particules avec le critère Q à $t = 2$ s

4.3.2 Formation des cristaux de glace dans le jet turbulent en sortie de moteur

Cette section étudie les paramètres décrivant les propriétés des cristaux de glace formés lors de la formation des traînées de condensation.

Comme indiqué par Kärcher *et al.* (1996), il est très important de connaître précisément la taille des cristaux de glace, leur concentration ainsi que leur répartition spatiale et leur distribution en taille lorsque l'on s'intéresse à la formation d'une traînée de condensation. Ces caractéristiques sont importantes, car elles permettent de calculer l'épaisseur optique des traînées de condensation. Ce critère permet de dire si une traînée de condensation est visible ou non.

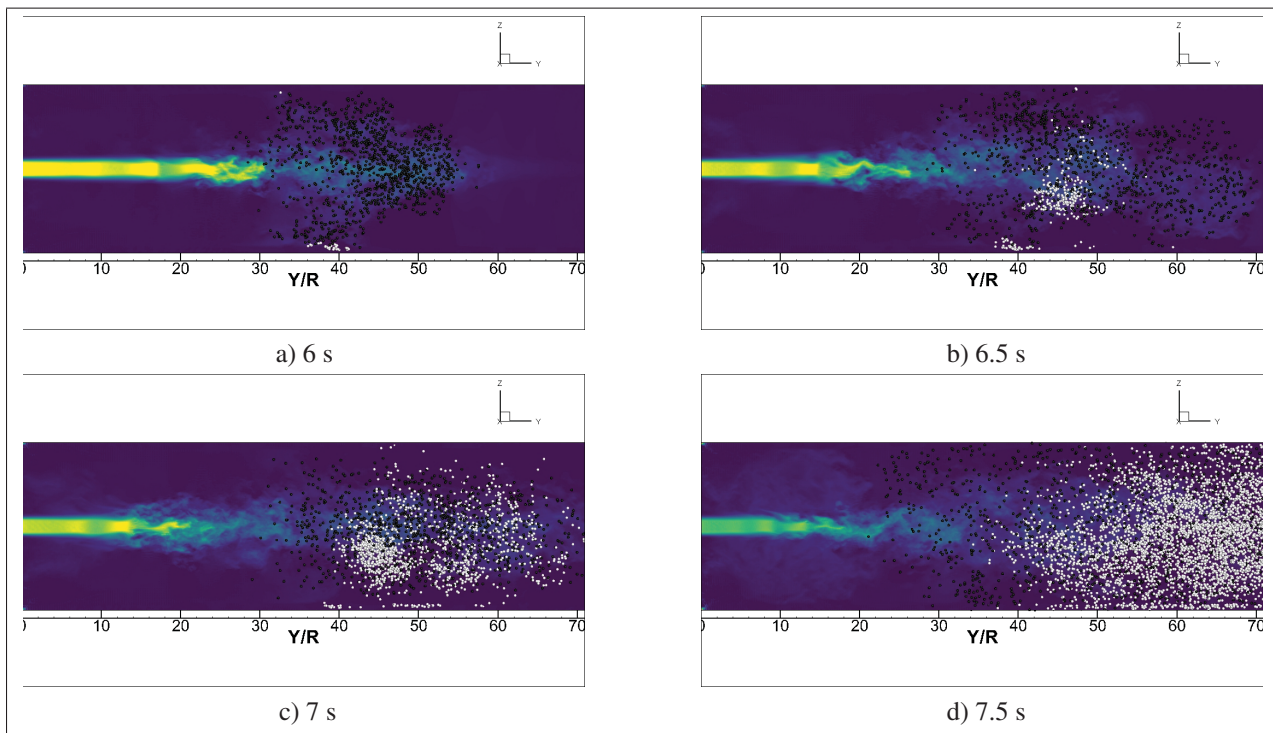


FIGURE 4.4 Évolution des particules de glaces (points blancs) et de suies (point noir) à différent temps dans le champ scalaire de la vitesse adimensionnée

La Figure 4.4 donne une visualisation de l'évolution des cristaux de glace à différents temps le long de l'isocontour représentant la vitesse en sortie du jet. Les particules de suie ont un rayon de 20 nm en sortie d'injecteur. Comme indiqué dans le chapitre précédent, le panache se refroidit en aval du jet et dans ces conditions, le jet d'air devient sursaturé. La vapeur d'eau produite par le moteur se condense et se cristallise sur les particules de suie donnant ainsi naissance aux cristaux de glaces. Ces dernières grossissent alors au fur et à mesure qu'elles s'éloignent de la buse du moteur.

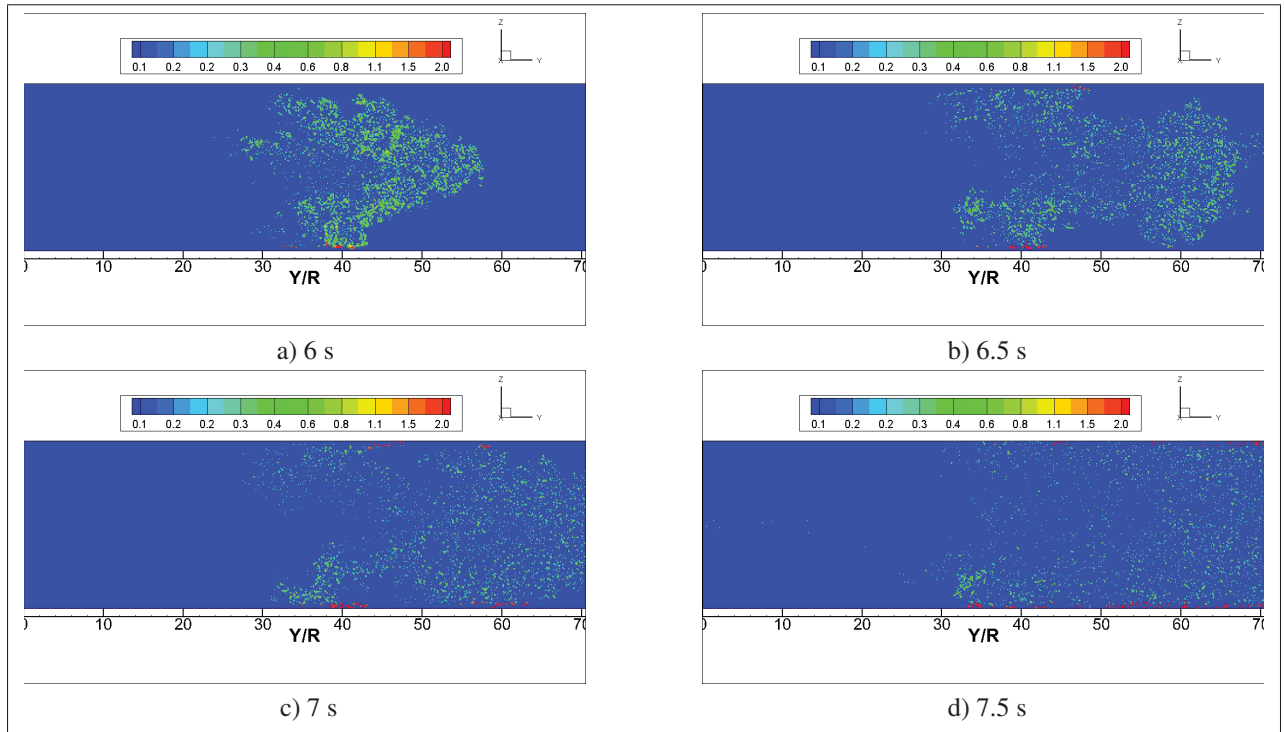


FIGURE 4.5 Évolution des rayons adimensionnés des particules dans le domaine de calcul

La figure 4.4a montre que les cristaux de glace se forment au bord du jet c'est-à-dire dans la zone de mélange du jet et de l'air ambiant. Dans cette région, par des mécanismes de diffusion (moléculaire) avec l'atmosphère froide et « sèche », la température et la teneur en vapeur d'eau diminuent. Ce résultat est en adéquation avec les observations visuelles de traînées de condensation par Schumann (1996) et avec les résultats obtenus par Khou (2016). Ils indiquent que les cristaux de glace se forment en premier lieu à la périphérie du jet, dans les zones froides. Par contre au cœur du jet, la température n'est pas encore suffisamment basse (580 K) pour permettre à la glace de se former. Par la suite, les cristaux de glace se forment au cœur du jet, comme indiqué par les figures 4.4b et 4.4c. Cela est dû aux phénomènes de mélange turbulent présents dans le jet et qui ont permis de refroidir l'ensemble du jet (Guignery (2010a)). Le jet devient alors sursaturé et permet aux particules de glaces de croître. À la fin du calcul, l'ensemble du jet est, et de manière homogène, à la température de l'air ambiant (220 K) ce qui permet aux particules de glace de se former et d'occuper une grande partie du jet (figure 4.4d).

Ces résultats sont soutenus par la figure 4.5 montrant les isocontours de l'évolution des rayons adimensionnés des particules dans le domaine de calcul. Dans un premier temps, les particules croissent à la périphérie du jet, dans les zones froides (rayon supérieur à 1). Par la suite, les particules de glace se forment dans l'ensemble du panache dû au refroidissement du jet. Les plus grosses particules se trouvent en périphérie du jet dû au fait que la saturation y est plus élevée.

La figure 4.6 représente l'évolution du rayon moyen des cristaux de glace dans le sillage de l'avion à un $t = 9$ s après émission. Le rayon moyen correspond à la moyenne des rayons de l'ensemble des particules sur une tranche à une distance x du panache. On regarde également le nombre de particules ayant un rayon supérieur à celui des suies. Ces dernières sont considérées alors comme des cristaux de glace. Le rayon moyen est calculé comme suit :

$$r_m = \frac{\sum_{i=1}^{n(y)} r_{p,i} N_i V_i}{\sum_{i=1}^{n(y)} N_i V_i} \quad (4.4)$$

Avec :

- $n(y)$ le nombre de cellules de maillage dans le plan situé à la distance y .
- $r_{p,i}$ le rayon des particules dans la cellule i .
- N_i la densité de particules dans la cellule i .
- V_i le volume de la cellule i .

Le tracé des rayons de particules, r_m , à $t = 9$ s montre que les rayons moyens des particules augmentent au fur et à mesure que l'on s'éloigne de la tuyère. Cela est dû, comme indiqué précédemment, au refroidissement du panache loin de la buse d'éjection. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux de Khou (2016) en termes de rayon moyen à une distance de 70 m. La croissance des particules commence à une distance de 30 m. Cela est dû au fait que les particules situées au centre du panache sont généralement des particules de suies (particules qui ne sont pas activées) et contribuent majoritairement au calcul du rayon moyen des particules. Cette région ne favorise pas alors la formation des cristaux de glaces due à la température élevée au centre du

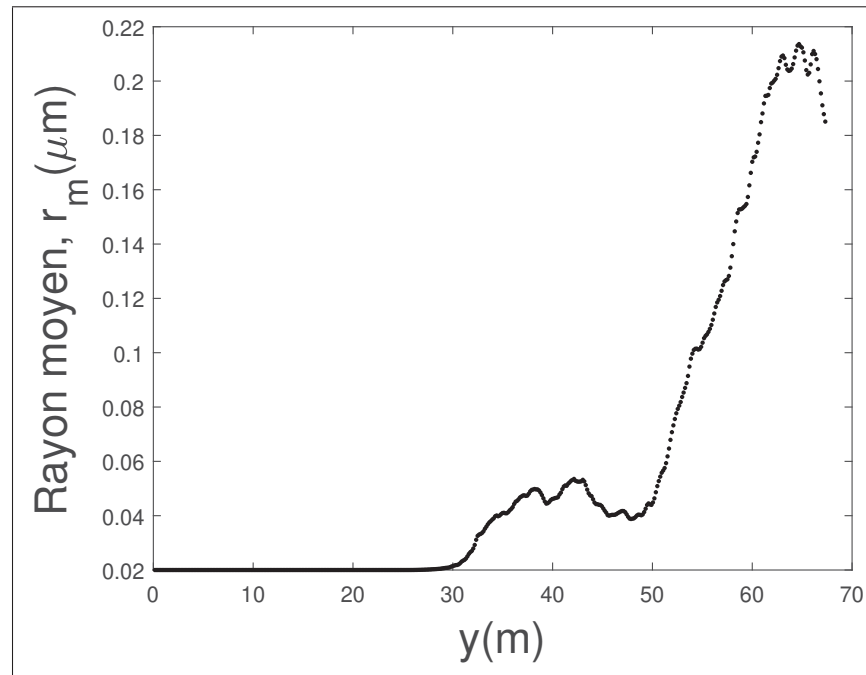


FIGURE 4.6 Évolution spatiale du rayon moyen des cristaux de glace r_m à 9 s

jet. Dans un premier temps, les particules de glaces croissent pour atteindre $0,06 \mu m$ à 40 m derrière la buse d'éjection. Puis au fur et à mesure que la dynamique du panache évolue dans l'espace, le rayon moyen des particules augmente pour atteindre une valeur de $0,220 \mu m$ à 69 m. Ainsi, plus on avance dans le temps et dans l'espace, plus la température du panache diminue pour atteindre la température de l'air ambiant, favorisant ainsi la croissance des cristaux de glace (Schumann (1996)).

La suite de l'étude montre la répartition en taille des cristaux de glace, la PDF (Probability Density Function) des rayons des cristaux sur la figure 4.7 à 9 s après éjection des particules de suies du moteur. La PDF donne la probabilité qu'a une particule d'avoir son rayon compris dans une classe de rayon donné. La distribution possède un pic et est centrée sur $0.02 \mu m$ et s'étale entre 0 et $0.1 \mu m$. Cette tranche correspond à la partie du jet qui est restée proche de sa position initiale. La température du panache est donc proche de celle du jet et ne favorise pas grandement la croissance des particules. Il est à remarquer qu'à ce temps, une grande partie des particules correspondent à des particules de suie sèches (qui n'ont pas été activés). Par la

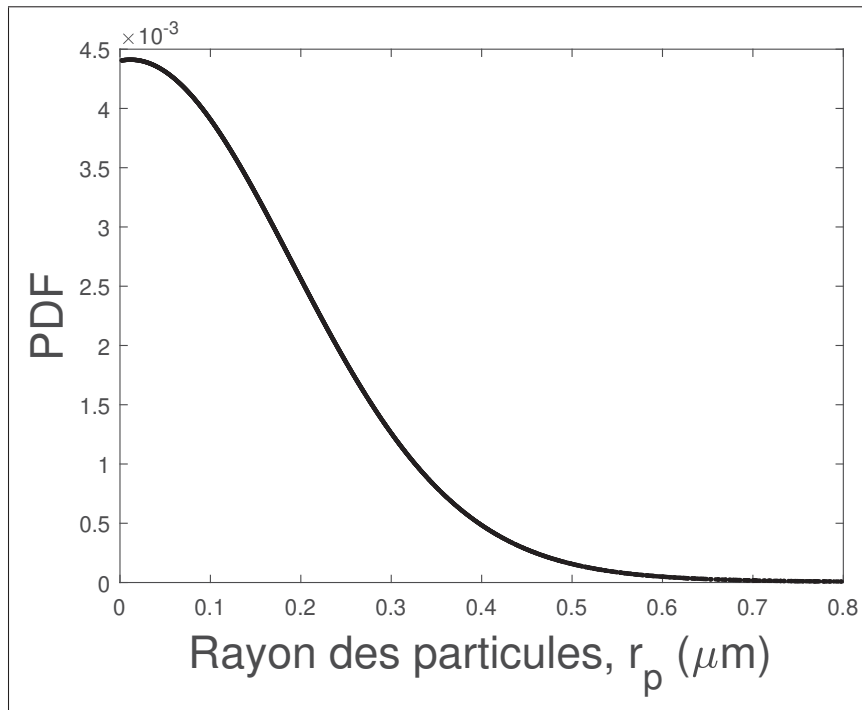


FIGURE 4.7 PDF des rayons des particules à 9 s

suite, le jet se sature en eau permettant ainsi la croissance des particules de suies en particules de glaces. La distribution s'étale entre $0.1 \mu\text{m}$ et 500 nm . Ainsi, plus l'évolution du panache avancera dans le temps et l'espace, plus la température à l'intérieur du jet baissera et favorisera la croissance des cristaux de glace, plus la distribution translatera vers des tailles de particules plus importantes. Cela rejoint les résultats obtenus précédemment sur l'évolution des rayons moyens des particules et les résultats de Guignery (2010a). De plus, il est à constater que la distribution a la même forme suivant une loi type gaussienne. Ce qui indique que les particules sont encore entrain de croître. D'après Paoli et al. (2013a), la PDF suit une loi de répartition log-normale à la fin du processus de croissance des particules.

La taille des cristaux de glace ainsi que leur concentration sont des propriétés majeures, car elles influencent la visibilité de la traînée de condensation. Cette visibilité est définie par le calcul de l'épaisseur optique qui mesure le degré de transparence d'un milieu. L'épaisseur optique est définie tel que :

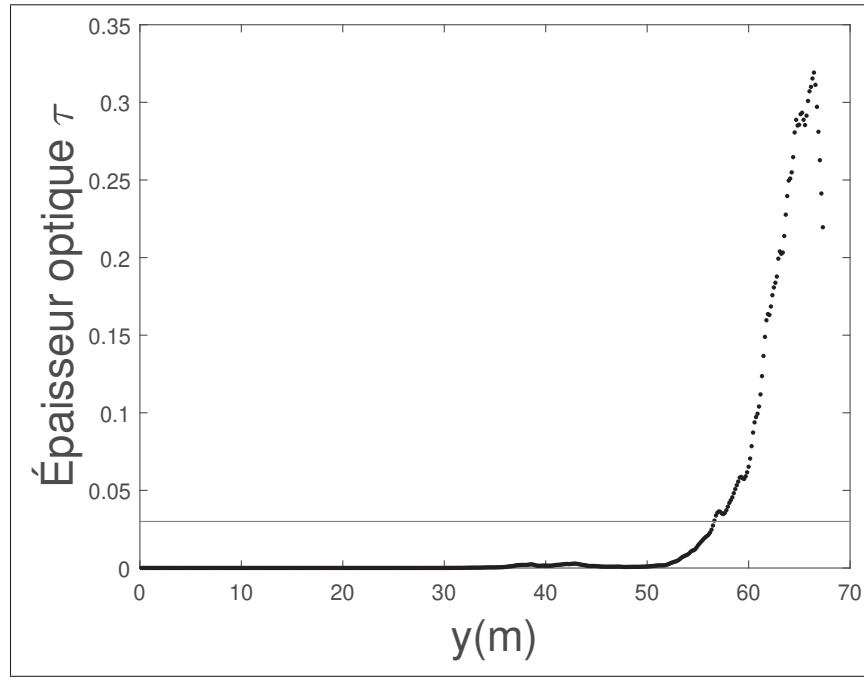


FIGURE 4.8 Évolution spatiale de l'épaisseur optique τ à 9 s

$$\tau = \pi r_p^2 N Q_{ext}(r_p) \Delta y \quad (4.5)$$

Où Q_{ext} représente le coefficient d'extinction de Mie, qui dépend de la longueur d'onde étudiée et du rayon des particules et est définie par Hulst & van de Hulst (1957) comme suit :

$$Q_{ext}(r_p) = 2 - \frac{4}{e} \left[\sin(e) - \frac{1 - \cos(e)}{e} \right] \quad (4.6)$$

$$e = \frac{4\pi r_p (\mu_r - 1)}{\lambda_w} \quad (4.7)$$

Où μ_r représente l'indice de réfraction du milieu et est égale à 1,31 pour la glace. λ_w est la longueur d'onde correspondant à la lumière visible et est équivalent $0,55 \mu m$. Une traînée de condensation est visible pour $\tau > 0,03$ (Kärcher et al. (1996)). Mais cette valeur n'est qu'une

indication du fait que la visibilité réelle dépend d'un grand nombre de paramètres tels que la longueur d'onde de la lumière, les conditions de visibilité et l'angle de vue. La figure 4.8 représente le calcul de l'épaisseur optique τ à $t = 9$ s après éjection des particules de suies par le moteur. Étant donné que le calcul de l'épaisseur optique dépend du rayon des particules, l'épaisseur optique augmente à mesure que l'on s'éloigne de l'avion cela même indépendamment du temps. Dans un premier temps, le panache crée par la formation de la traînée de condensation n'est pas visible ($\tau > 0,03$) sur les 55 premiers mètres. En effet, les particules de glace présentes au centre et sur les bords du panache ne sont pas assez grosses et peu de particules sont devenues des cristaux de glace à cette distance (i.e référence figure 4.4d). Ainsi, le critère de visibilité n'est pas satisfait. Par la suite, le panache se sature en eau, permettant aux rayons de particules de glaces de croître. À une distance supérieur à 60 m, le seuil de visibilité $\tau > 0,03$ est atteint. Elle atteint la valeur maximale de $\tau = 0,34$ à 69 m. Dans la littérature, aucune mesure d'épaisseur optique pour un temps inférieur à 60 s n'a été trouvée. Cependant, les résultats obtenus sur l'épaisseur optique peut être comparés à ceux de Khou (2016) et Paoli et al. (2013b). Ces derniers ont été choisis, car ils se rapprochent le plus de notre étude et cela permet de donner des ordres de grandeur aux propriétés de l'épaisseur optique. Paoli *et al.* (2013b) obtiennent une épaisseur optique seuil de $\tau = 0,27$. Les résultats sont en cohésion par rapport au seuil trouvé par notre étude. Par contre, Khou (2016) trouve une épaisseur optique seuil de $\tau = 0,7$. L'épaisseur optique maximale obtenue est le double par rapport aux résultats obtenus. Ceci est dû à des propriétés atmosphériques ambiantes différents. Il est à remarquer aussi que Khou (2016) prend en compte le tourbillon de sillage dans la formation de la traînée de condensation, ce qui a un impact sur la croissance des particules et leur temps de formation. En effet, Khou (2016) observe des rayons plus importants lors de la formation des traînées de condensation. Mais en termes d'ordre de grandeur, les résultats obtenus sont en bon accord avec les études de Khou (2016) et Paoli *et al.* (2013b) à distance semblable. La distance pour la visibilité des traînées de condensation dépend fortement de nombreux paramètres. Par conséquent, cette dernière peut varier de quelques mètres derrière les sorties moteurs jusqu'à plusieurs dizaines de mètres, comme l'indique Khou (2016) et Schumann (1996).

Pour finir, la température des particules de glace et la masse totale de glace liée à la croissance des particules de glace, définie par $m_p = \sum_p \frac{4}{3}\pi r_p^3 \rho_p$, où r_p est le rayon des particules et ρ_p est la masse volumique des particules, sont représentées sur les sur la figure 4.9 et 4.10.

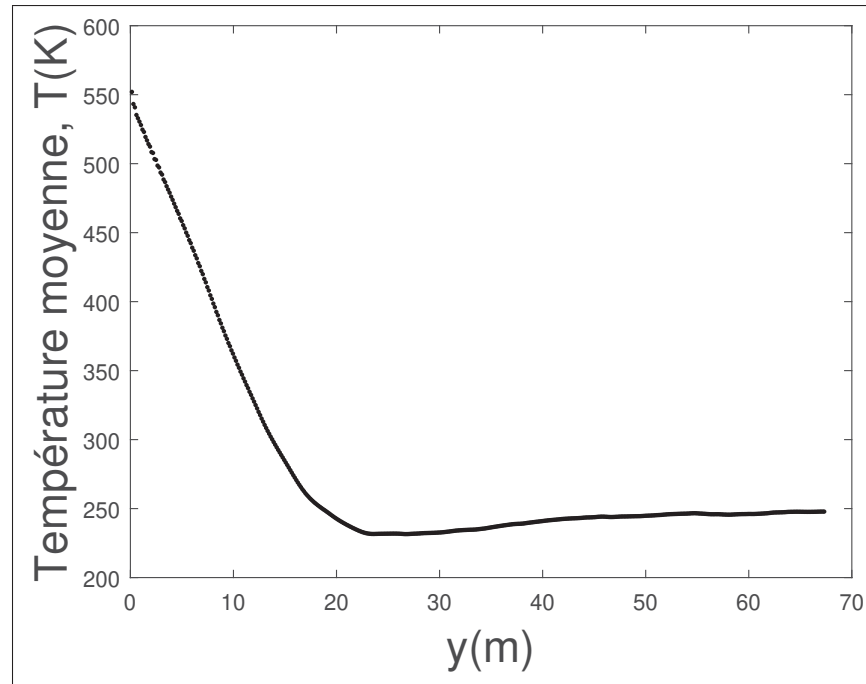


FIGURE 4.9 Évolution spatiale de la température moyenne des particules à 9 s

Dans cette étude, le comportement des particules de suies est considéré comme un traceur passif dans le jet chaud turbulent, ainsi il n'influence aucunement la dynamique du jet. Par conséquent, la température de glace suit l'évolution de la température du jet. Comme attendu, la température des particules de suies conserve la valeur maximale initiale de celle au centre du jet. Pendant la période de transition, elles chutent rapidement atteignant la valeur de la température de l'air ambiant, cela indépendamment du temps après éjection des particules de suies. Ce comportement est en adéquation avec les résultats trouvés pour les rayons des particules.

La figure 4.10 montre l'évolution de la masse moyenne des particules de suie/glace dans le sillage de l'avion. Ce dernier croît linéairement jusqu'à atteindre 20 ng, puis la valeur de masse se stabilise à 20 m pour atteindre un plateau cela indépendamment du temps. On remarque que

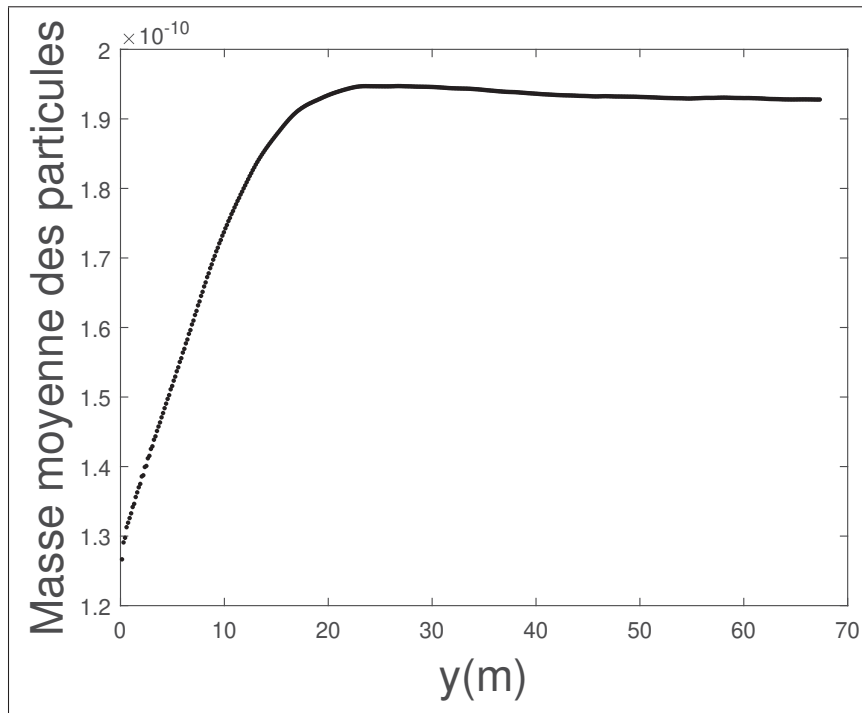


FIGURE 4.10 Évolution spatiale de la masse moyenne des particules des particules à 9 s

la masse moyenne des cristaux de glace reste faible à tout temps. Cela est dû particulièrement au temps de séjour de la particule. Dans notre cas, le temps de séjour est faible lorsque l'on s'intéresse aux processus microphysiques intervenant dans le panache (Guignery (2010a)). Ce dernier caractérise le fait qu'une majorité des particules de suie ne sont pas encore saturées, affectant le nombre de cristaux de glace dans le sillage et ainsi le calcul de la masse de cette dernière. Le nouveau challenge, sera alors d'être capable de poursuivre le calcul jusqu'à un temps plus loin, puisque les données expérimentales n'existent pas dans ce cas.

4.4 Bilan du chapitre

Dans ce chapitre, l'étude vise à mettre en place une simulation numérique de la formation d'une traînée de condensation à une altitude de vol avec un moteur CFM56 en y ajoutant les processus microphysiques de croissance des cristaux de glace. Pour cela, il a été proposé de modéliser un jet d'air turbulent à la sortie d'un moteur CFM56 avec des particules de suies. Ces

dernières, en présence de la vapeur d'eau en sortie de moteur, deviennent des cristaux de glace. La configuration du calcul numérique a été présentée dans un premier temps. Les particules sont traquées par une méthode Lagrangienne tandis que le fluide est modélisé par une méthode eulérienne.

La première partie de ce chapitre a été consacrée à l'interaction jet/particules de suies en ne prenant pas en compte le modèle microphysique. Cette étape a permis d'observer le caractère passif des particules de suies/cristaux de glace dans le jet turbulent. Les particules de suies/cristaux de glaces n'influencent aucunement la dynamique du jet turbulent. Par contre, la turbulence du jet influence grandement la formation des cristaux de glace.

La deuxième partie de l'étude se concentre sur la formation des cristaux de glace dans le sillage de l'avion. Il s'agit de la modélisation de l'écoulement du jet turbulent avec la modélisation de la microphysique régissant la croissance des particules. Ici, un mélange gazeux, issu de la combustion, composé uniquement d'air, d'eau et de particules de suie est considéré. Les premiers résultats ont permis de montrer la capacité du code FLUDILES à simuler la formation d'une traînée de condensation. Les premières analyses montrent que les cristaux de glace se forment premièrement dans les parties froides du jet, ici la périphérie du jet. Ce résultat est en cohérence avec la littérature. Puis les particules de grandes tailles se trouvent loin en aval du jet. Cela est du fait qu'à cet emplacement la température du jet d'air a atteint la valeur de la température de l'air ambiant, favorisant ainsi la croissance des cristaux de glace.

Pour conclure, ces premiers calculs ont permis de confirmer le potentiel de l'outil numérique à modéliser la formation d'une traînée de condensation en prenant en compte les données en sortie d'un moteur CFM56.

CHAPITRE 5

ÉTUDES PARAMÉTRIQUES DU TAUX DE DILUTION SUR DE LA FORMATION DES TRAÎNÉES DE CONDENSATION

5.1 Introduction

Le chapitre précédent a mis en évidence la capacité du code FLUDILES à modéliser la formation d'une traînée de condensation en prenant en compte les caractéristiques d'un moteur CFM56. Néanmoins, des incertitudes demeurent sur l'impact de certains paramètres du moteur, comme le taux de dilution, sur la formation des traînées de condensation. En effet, le taux de dilution du moteur joue un rôle important sur la formation des cristaux de glace (Kärcher *et al.* (1996), Schumann (2000b), Detwiler & Jackson (2002)). Cet impact n'a pas été étudié pour la formation des traînées de condensation. De plus, lors de la modélisation du jet en sortie de moteur, les études ne prennent pas en compte le flux secondaire, mais considèrent le jet en sortie de moteur comme un mélange des deux flux (le flux primaire et secondaire). Or, la croissance des particules de glace dépend de la dynamique du jet turbulent en sortie de moteur. Ainsi, l'étude dans le présent chapitre vise à répondre au troisième sous-objectif de la thèse, à savoir, faire une étude de sensibilité afin d'évaluer l'influence du taux de dilution du moteur sur la formation des traînées de condensation.

Pour atteindre l'objectif du chapitre, les paramètres de configuration numérique du jet d'air à la sortie du moteur d'avion sont d'abord présentés. Il est à remarquer ici que pour des soucis de coût de calcul, la simulation temporelle pour le jet turbulent a été choisie. L'évolution temporelle du jet peut présenter qualitativement les mêmes phénomènes physiques qu'une simulation spatiale et nécessite moins de points de maillage (Gago *et al.*, 2003). En effet, Brancher (1996) a montré que l'instabilité primaire qui se développe dans le jet (l'instabilité de Kelvin Helmholtz) est de nature convective et peut être modélisée à l'aide d'une approche temporelle. De plus, Ferreira Gago, Brunet & Garnier (2002) ajoute qu'une simulation temporelle fait appel à l'hypothèse de Taylor (Taylor, 1935), selon laquelle la variable de temps t et la position y peuvent être considérées comme équivalentes. Ces deux dernières sont alors liées par la relation $t=y/V_0$, où

V_0 désigne la vitesse de l'avion. Par la suite, deux analyses seront effectuées pour comprendre l'effet du taux de dilution sur la croissance des particules. La première analyse consiste à voir l'effet du flux secondaire sur la formation des traînées de condensation. Ici, on fait la distinction entre un moteur double flux et un moteur monoflux. Dans la seconde partie, l'effet du taux de dilution sur la formation des traînées de condensation est étudié. Pour cela, trois moteurs d'avion avec différents taux de dilution ont été étudiés.

5.2 Spécifications générales du moteur

Le taux de dilution entre le flux primaire et secondaire joue un rôle majeur sur le rendement du moteur d'avion. On définit le taux de dilution (bpr) entre le flux primaire et secondaire comme le rapport entre le débit massique de l'air dans la partie du flux secondaire et le débit massique de l'air dans la partie du flux primaire.

$$bpr = \frac{\dot{m}_b}{\dot{m}_c} \quad (5.1)$$

Où \dot{m}_b est le débit massique de l'air dans le flux secondaire et \dot{m}_c est le débit massique de l'air dans le flux primaire.

Par la suite, la poussée spécifique est définie par Farokhi (2014) comme le rapport entre la poussée du moteur d'avion F et le débit massique de l'air passant dans le moteur. Ici, deux distinctions sont à faire. Premièrement, dans le cas où la vitesse du flux primaire d'air est considérée égale à la vitesse du flux secondaire, ce qui entraîne que le jet résultant du moteur d'avion est une somme des deux flux (cas monoflux). Cette hypothèse mène à la définition de la poussée spécifique suivante :

$$\frac{F}{\dot{m}_s} = (U_s - U_\infty) \quad (5.2)$$

Où \dot{m}_s représente le débit massique de l'air passant dans le moteur, U_∞ la vitesse de l'air ambiant et U_s la vitesse du jet en sortie de moteur.

Deuxièmement, le cas où une distinction est faite entre le flux secondaire et le flux primaire (cas double flux), la poussée spécifique est définie par Farokhi (2014) comme suit :

$$\frac{F}{\dot{m}_c + \dot{m}_b} = \frac{U_c + bpr.U_b}{1 + bpr} - U_\infty \quad (5.3)$$

Où U_c est la vitesse du jet dans le flux primaire, U_b la vitesse du jet dans le flux secondaire et bpr le taux de dilution. Dans le cas où l'on fait la distinction entre le jet primaire et secondaire ; le jet primaire contient une grande partie de la chaleur produite par la combustion dans le moteur et aussi toute la vapeur d'eau résultant de la combustion des hydrocarbures tandis que le jet secondaire ne comporte aucune partie de la chaleur dégagée par la combustion.

Finalement, le rendement global est défini par Cumpsty & Heyes (2015) comme le rapport entre le travail du moteur sur l'énergie du combustible fourni :

$$\eta = \frac{FU_\infty}{\dot{m}_f Q} \quad (5.4)$$

Où \dot{m}_f représente le débit massique du carburant et Q la chaleur spécifique du carburant.

Dans ce chapitre, le moteur est modélisé par un volume de contrôle avec des conditions limites pour que la vitesse soit uniforme sur tout le volume de contrôle comme montré sur la figure 5.1. La figure 5.1 a représente un turboréacteur à double flux, où une fraction de l'air en entrée ne passe qu'en partie dans le compresseur, l'autre part contourne le moteur jusqu'à la tuyère. Dans ce cas de figure, la vitesse du flux primaire est différent de celui du flux secondaire. La figure 5.1 b représente un turboréacteur avec un monoflux. La vitesse du jet est uniforme à la sortie du moteur d'avion.

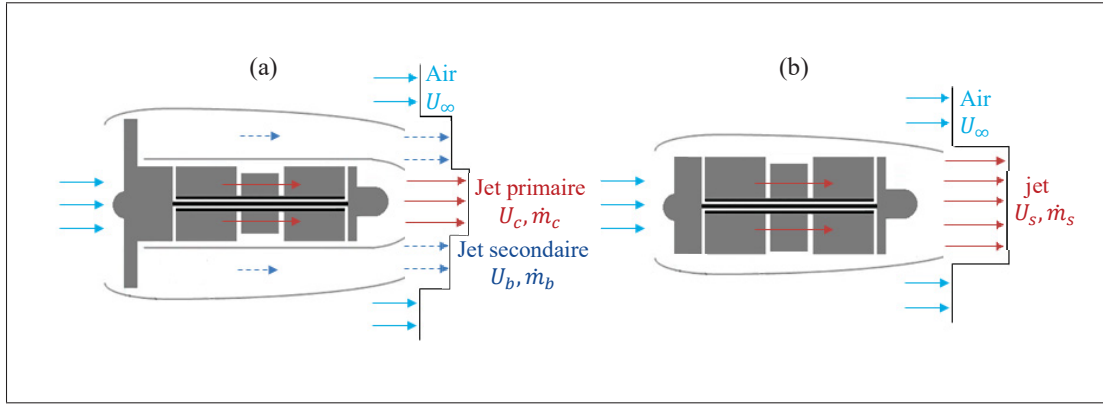


FIGURE 5.1 Représentation schématique d'un moteur d'avion : (a) Double flux (b) Monoflux équivalent

5.3 Configuration numérique

5.3.1 Configuration numérique pour l'étude paramétrique du double flux

Pour la simulation temporelle, un jet turbulent débouchant d'une buse de rayon R dans un fluide dont la vitesse est U_∞ est considéré. Ici, les vitesses sont adimensionnées par la vitesse au centre du jet et les longueurs sont adimensionnées par le rayon R . R correspond à l'épaisseur à demi-vitesse telle que $U(R) = \frac{1}{2}(U_{r=0} + U_\infty)$ où $U_{r=0}$ est la vitesse au cœur du jet. Dans le cas où les propriétés du flux primaire sont égales à celle du flux secondaire (figure 5.2b), et que la vitesse en sortie de la buse est considérée comme un mélange entre les deux flux, le profil de vitesse est initialisé en utilisant un profil de vitesse classique de type chapeau :

$$U(r) = \frac{1}{2}(U_s + U_\infty) - \frac{1}{2}(U_s - U_\infty) \tanh\left(\frac{1}{4} \frac{R}{\theta} \left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r}\right)\right) \quad (5.5)$$

Où θ désigne l'épaisseur de quantité de mouvement et r , dans le repère cartésien, est donné par la relation $r = \sqrt{x^2 + z^2}$. Dans le cas où une distinction est faite entre le flux primaire et secondaire en sortie de vitesse d'avion (figure 5.2a), ce qui entraîne une différence entre la

vitesse du jet dans le flux primaire et la vitesse du jet dans le flux secondaire, le profil de vitesse est considéré comme une somme de deux profils en tangente hyperbolique (équation 5.6) :

$$U(r) = aU_1(r) + bU_2(r) \quad (5.6)$$

$$U_1(r) = \frac{1}{2}(U_c + U_\infty) - \frac{1}{2}(U_c - U_\infty) \tanh\left(\frac{1}{4}\frac{R}{\theta}\left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r}\right)\right) \quad (5.7)$$

$$U_2(r) = \frac{1}{2}(U_b + U_\infty) - \frac{1}{2}(U_b - U_\infty) \tanh\left(\frac{1}{4}\frac{R}{\theta}\left(\frac{r}{R} - \frac{R}{r}\right)\right) \quad (5.8)$$

Où les constantes a et b dépendent des caractéristiques du moteur et du taux de dilution. Pour la configuration «avec un double flux» pour le moteur CFM56, la constante a a été prise égal à 0,75 et b à 0,25. Le profil initial de température est donné par la relation de Crocco-Busemann (Candel & Barrère (1990) (voir chapitre 4). La longueur du domaine de calcul dans la direction de l'écoulement est de $L_y = 20R$. Pour discrétiser ce domaine, le maillage est régulier dans les trois directions de l'espace. Cela correspond à $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = 0.15R$, ce qui équivaut à environ 2 millions de cellules. Une condition de non-réflexion est utilisée pour les conditions transverses et une condition de périodicité est employée dans la direction axiale.

Un moteur d'avion CFM56 avec un taux de dilution de 6 est utilisé. La première configuration consiste à un moteur avec un double flux, la vitesse du flux primaire et du flux secondaire est considérée comme inégale (configuration A). Pour le second, le moteur produit un jet en sortie de tuyère qui résulte de la somme entre les vitesses du flux primaire et secondaire (configuration B). Ainsi, pour pouvoir comparer ces deux simulations, la poussée spécifique doit être la même pour les deux simulations, c'est-à-dire que $\frac{F}{\dot{m}_j}$ sont égaux pour les deux simulations. Pour un avion de ligne équipé d'un moteur CFM56 à 11 km, la poussée spécifique est équivalente à 151 kN/kg Fuel. Avec cette donnée d'entrée et en utilisant les équations 5.2 et 5.3, pour la configuration A, la vitesse du flux primaire U_c est 471 m.s⁻¹ et pour la vitesse du flux secondaire

U_b , elle est de $376,9 \text{ m.s}^{-1}$. Pour la configuration B, la vitesse du jet en sortie de tuyère U_s est de $390,3 \text{ m.s}^{-1}$. De plus, les paramètres supplémentaires pour les deux simulations sont donnés par le tableau 5.1.

TABLEAU 5.1 Paramètre de la simulation pour le jet en sortie de tuyère

Température ambiante	$T_{\infty}(K) = 220 \text{ K}$
Fraction molaire de la vapeur pour le jet	$X_{(H_2O)_{v-jet}} = 3.10^{-2}$
Fraction molaire de la vapeur ambiante	$X_{(H_2O)_{v-\infty}} = 10^{-5}$
Pression ambiante	$P_{\infty} = 24000 \text{ Pa}$
Nombre de particules numériques	$N_p = 250000$
Rayon initial des particules de suies	$r_{p,0} = 20.10^{-9} \text{ m}$

Comme indiqué précédemment, le profil de vitesse initiale pour la configuration B consiste en un profil classique en tangente hyperbolique et en une somme de deux tangentes hyperboliques pour la configuration A. Ces deux profils initiaux sont montrés sur la figure 5.2.

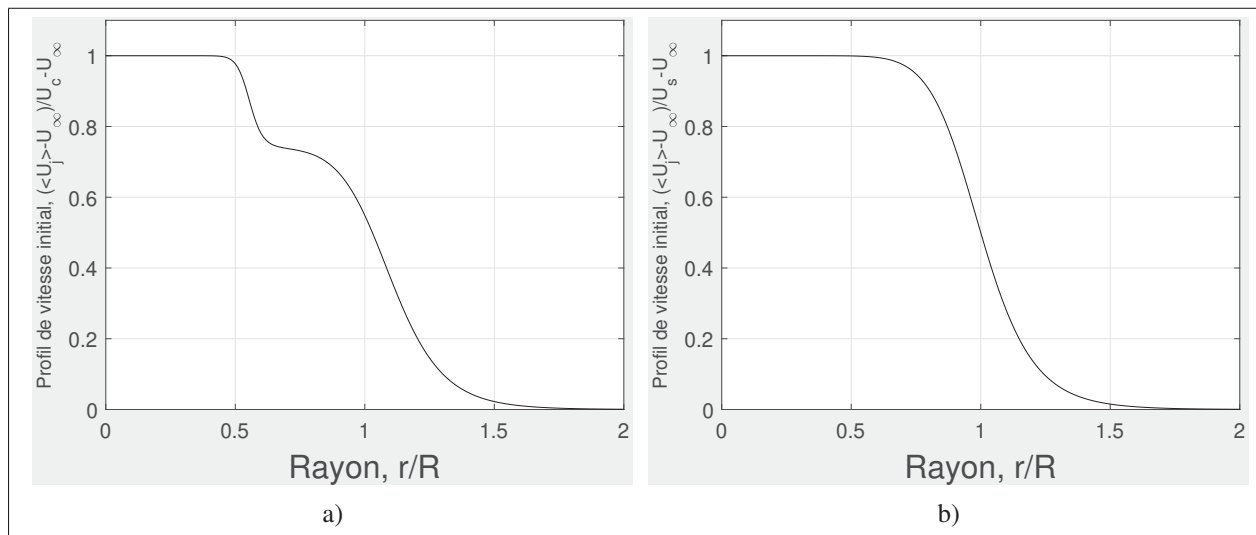


FIGURE 5.2 Représentation du profil initial de vitesse pour les deux configurations : (a) Double flux (b) Monoflux équivalent

Pour vérifier la dynamique du jet et le maillage choisi, le processus de transfert d'énergie au sein de l'écoulement est étudié. L'énergie cinétique turbulente dégagée par les petites échelles reste faible tout le long du calcul par rapport aux énergies cinétiques turbulentes des grandes échelles. Dans ce cas, le spectre de l'énergie cinétique turbulente pour les deux simulations est calculé et présenté sur la figure 5.3. La figure 5.3 indique que la turbulence est bien développée aux temps considérés, la pente en $-\frac{5}{3}$ est retrouvée pour les moyennes et grandes échelles. Le faible niveau d'énergie contenue dans les grands nombres d'ondes confirme que l'écoulement du jet turbulent en sortie de moteur est bien résolu pour le maillage choisi.

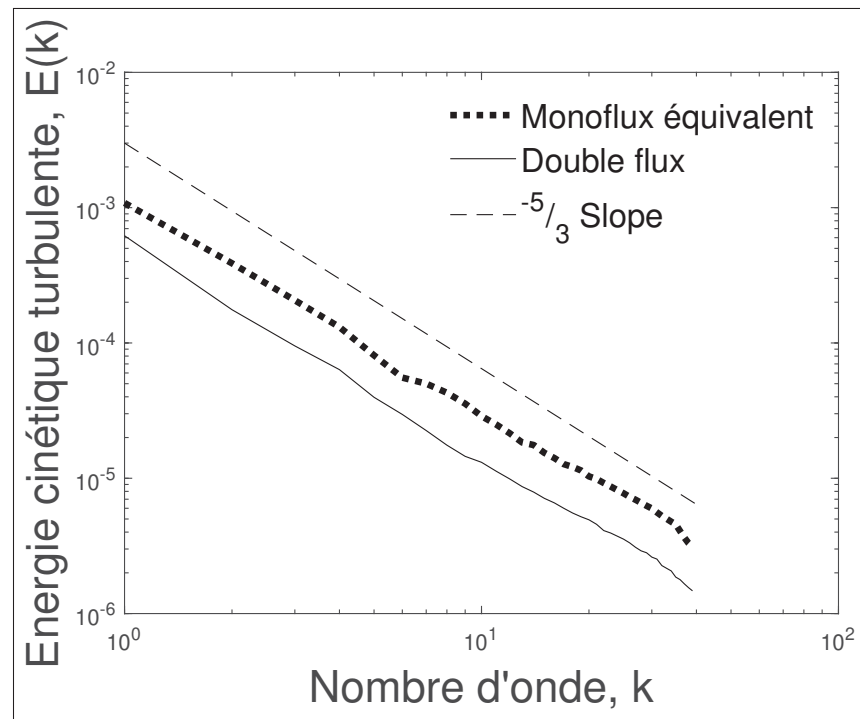


FIGURE 5.3 Spectre de l'énergie cinétique turbulente

5.3.2 Configuration numérique pour l'étude paramétriques du taux de dilution

Trois moteurs avec des taux de dilution différents sont étudiés : le PW JT8D avec un taux de dilution de 1,7 ainsi que le CFM56 avec un taux de dilution de 6 et le LEAP1A avec un taux de dilution de 10,5. Les caractéristiques des trois moteurs sont présentées dans le tableau 5.2.

Les résultats pour les trois simulations sont pris à une altitude de croisière avec des conditions ambiantes définies à 24000 Pa, 240 K. Ce travail se concentre principalement sur le jet en sortie de moteur composé d'espèces miscibles, d'air et de vapeur d'eau, chargé de particules de suie initialement formées dans la chambre de combustion.

TABLEAU 5.2 Caractéristiques des trois moteurs : JT8D, CFM56, LEAP1A

Moteur	JT8D	CFM56	LEAP1A
Bypass ratio, bpr (-)	1.7	6	10.5
Rayon jet primaire, R_c (m)	0.434	0.32	0.32
Débit massique jet primaire, \dot{m}_c (kg.s ⁻¹)	68	28	19.8
Vitesse jet primaire, U_c (m.s ⁻¹)	421.3	471	412.5
Rayon jet secondaire, R_b (m)	0.48	0.59	0.71
Vitesse jet secondaire, U_b (m.s ⁻¹)	351	376.9	305.5
Température jet primaire, T_c (K)	531	480	552.9
Température jet secondaire, T_b (K)	255	253	240.5
Fraction molaire de la vapeur pour le jet $r, X_{(H_2O)_{v-jet}}$	$3 \cdot 10^{-2}$		
Nombre de particules numériques, N_p	250000		
Rayon initial des particules de suies, $r_{p,0}$ (m)	$20 \cdot 10^{-9}$		
Vitesse de croisière, U_∞ (m.s ⁻¹)	237.2		
Température ambiante, T_∞ (K)	220		
Pression statique, P_∞ (Pa)	24000		
Fraction molaire de la vapeur ambiante, $X_{(H_2O)_{v-\infty}}$	10^{-5}		

Les données du LEAP1A ont été fournies par SAFRAN et celles du JT8D ont été calculées par le logiciel GASTURB.

5.4 Résultats et discussion

Deux études comparatives ont été réalisées pour analyser l'impact du taux de dilution du moteur sur la formation d'une traînée de condensation. La première étude consiste à analyser l'influence du flux secondaire sur la formation des traînées de condensation. La poussée spécifique dans les deux configurations, un avec un monoflux et un avec un double flux, a été conservée pour voir l'effet du flux secondaire sur les caractéristiques du panache. Dans la deuxième partie, la formation des traînées de condensation en champs proches pour trois moteurs ayant différents taux de dilutions a été étudiée. Les deux approches sont présentées et analysées ci-dessous.

5.4.1 L'effet du flux secondaire sur la formations des traînées de condensation

Dans ce paragraphe, on considère l'évolution temporelle d'un jet chaud turbulent composé d'espèces miscibles, d'air et de vapeur d'eau, chargé de particules de suie initialement formées dans la chambre de combustion du moteur. Dans le jet en sortie de moteur, ces particules agissent comme des noyaux de condensation en raison de leur forme et de leurs propriétés. Ces dernières se cristallisent si des conditions favorables sont rencontrées, conduisant à la formation de traînées de condensation.

Pour faciliter la lecture et la compréhension du lecteur, la simulation où le jet en sortie de tuyère est composé d'un flux primaire et secondaire sera nommée « configuration double flux » (configuration A). La simulation où le jet en sortie de tuyère est considéré comme un mélange du flux primaire et secondaire sera nommée « configuration monoflux équivalent » (configuration B).

Un ensemble de simulation LES a été réalisé durant les 4 premières secondes d'émissions à un nombre de Mach égal à 0,9 pour se trouver dans les conditions de croisière d'un avion. L'objectif est d'analyser le comportement des particules, leur formation, leur croissance et leur influence sur le transfert thermique avec l'air ambiant.

Pour quantifier l'effet du flux secondaire sur la formation des particules de glaces et donc sur la formation des traînées de condensation, la première étape consiste à analyser l'évolution temporelle de la saturation du nombre de particules pour les deux configurations étudiées. Cette évolution au cours du temps est montrée dans la figure 5.4. Dans la configuration double flux, toutes les particules de suies sont devenues des cristaux de glaces à $t=1$ s. Cela signifie que les conditions de saturation sont atteintes en tout point de mélange. Pour la configuration monoflux, toutes les particules deviennent des cristaux de glaces à $t=2$ s. Dans cette optique, la prise en compte du flux secondaire dans la modélisation de la formation des traînées de condensation indique que ce dernier favorise la croissance des particules en cristaux de glace.

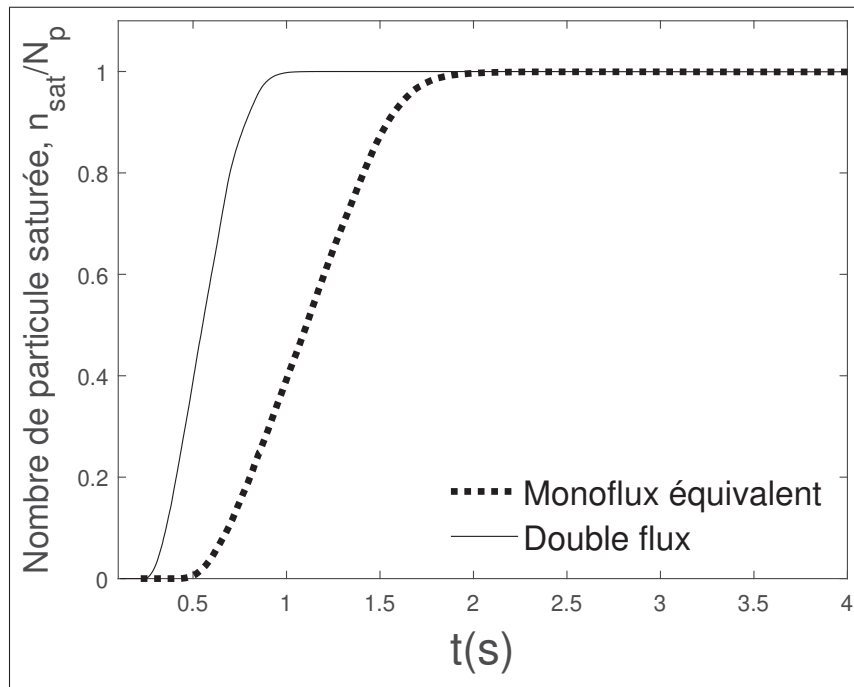


FIGURE 5.4 Évolution temporelle du nombre de particules de glace pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent

Dans un second temps, le graphe de l'évolution temporelle du rayon moyen des cristaux de glace (moyenne arithmétique, $r_m = \sqrt{(\sum_p r_p^2 / N_p)}$) (figure 5.5) et le graphe de l'évolution temporelle de la saturation moyenne du panache $S = P_w / P_{sat}$ (figure 5.6) sont tracés. Initialement, toutes les particules sont concentrées dans la partie chaude du jet en sortie de moteur, où les conditions

thermodynamiques pour la vapeur d'eau sont sous-saturées (c'est-à-dire $S < 1$). Par conséquent, pour la configuration double flux, le rayon moyen des cristaux de glace (r_m) ne change pas avant $t = 0,2$ s (0,5 s pour la configuration monoflux). Par la suite, l'air chaud en sortie du moteur se mélange à l'air ambiant. Étant plus froid, l'air ambiant entraîne la vapeur d'eau contenue dans le jet d'air chaud à se refroidir et donc au panache de se sursaturer (c'est-à-dire $S > 1$). Dans ces conditions, une couche de glace se forme autour des particules de suie et ainsi ces dernières deviennent des cristaux de glace. Par la suite, ces particules de glaces croissent et leurs rayons atteignent une valeur plateau. Pour la configuration monoflux, ce plateau est atteint à 3,5 secondes pour une valeur moyenne maximale du rayon des particules de $r_m = 3,5 \mu m$. Dans le cas de la configuration double flux, le plateau est de $r_m = 3,9 \mu m$ et cette dernière est atteinte à 2,5 secondes. Cela s'explique par le fait que la croissance des particules entraîne une diminution de la vapeur d'eau dans le jet en sortie de tuyère. Il est à remarquer que la configuration double flux donne des rayons de particules plus grands par rapport à la configuration monoflux. De plus, la saturation moyenne du panache est plus élevée pour la configuration double flux et la valeur maximale est atteinte à $t=0,8s$, par rapport à $t=1,3$ s pour la configuration monoflux. Cela indique que la présence du flux secondaire accélère la formation des cristaux de glace.

Les moyennes arithmétiques donnent une vue globale du phénomène de croissance des particules, mais il est important de voir comment la répartition des tailles des particules évolue dans le jet chaud turbulent. Pour cela, la fonction de distribution de probabilité (PDF, Probability Density Function) des tailles des cristaux de glaces est tracée, à plusieurs instants, sur la figure 5.7. La PDF au point r_p montre la probabilité qu'une particule ait un rayon r_p au temps considéré. Au début du processus de formation des cristaux de glaces, la gamme des rayons couverte par la PDF est plus grande pour la configuration double flux (0,2 à $3 \mu m$) par rapport à la configuration monoflux (0.1 À $1 \mu m$). Cela montre que, dans le cas de la configuration avec un double flux, les particules saturant en premier atteignent des rapports de saturation plus élevés.

Pour la configuration avec un double flux, la PDF des tailles de cristaux se rapproche d'une gaussienne à $t = 1$ s. Ce qui n'est pas le cas de la configuration avec un monoflux. Ce dernier atteint un profil gaussien vers $t = 2,5$ s. De plus, la gaussienne est moins large, en tout temps,

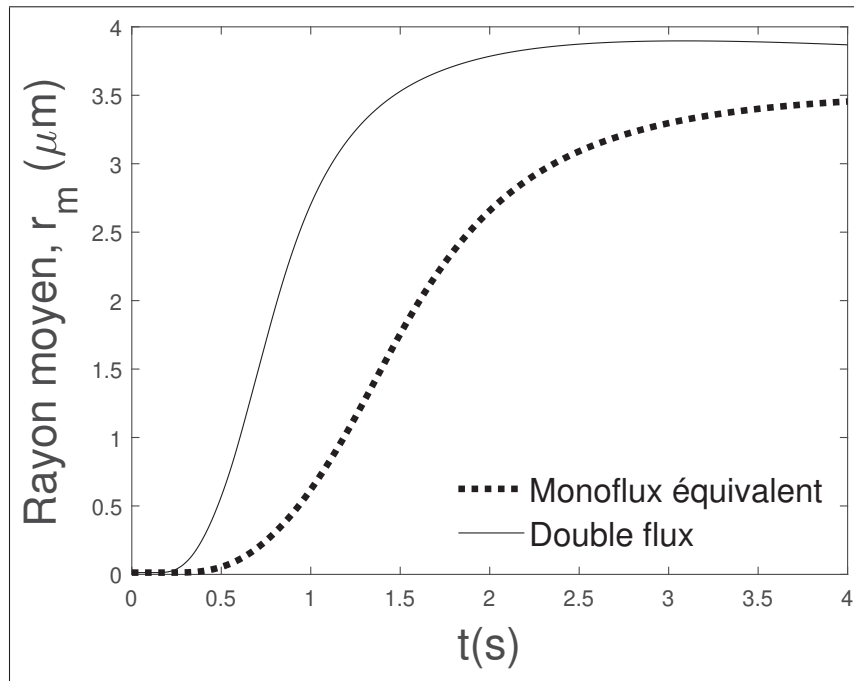


FIGURE 5.5 Évolution temporelle du rayon moyen des cristaux de glace r_m pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent

pour la configuration double flux, ce qui confirme que les rapports de saturation atteints par les particules diffèrent en fonction de l'écoulement. En outre, la configuration double flux tend à produire des cristaux de glace plus grands par rapport à la configuration monoflux. La taille maximale des particules est de $4 \mu m$ à 4 s pour la configuration avec un double flux contre $3,2 \mu m$ pour la configuration monoflux.

5.4.2 L'effet du taux de dilution du moteur sur la formations des traînées de condensation

La section précédente a montré l'importance du flux secondaire sur la croissance des cristaux de glaces à la sortie du moteur. Dans cette section, l'influence du taux de dilution du moteur, en prenant en compte le flux secondaire, sur la formation des traînées de condensation est étudiée.

La première partie de l'étude consiste à voir les grandeurs caractéristiques du jet en sortie de moteur tel que les grandeurs turbulentes de l'écoulement. Les évolutions temporelles et les grandeurs du champ sont étudiées en variables adimensionnées afin de pouvoir les comparer dans

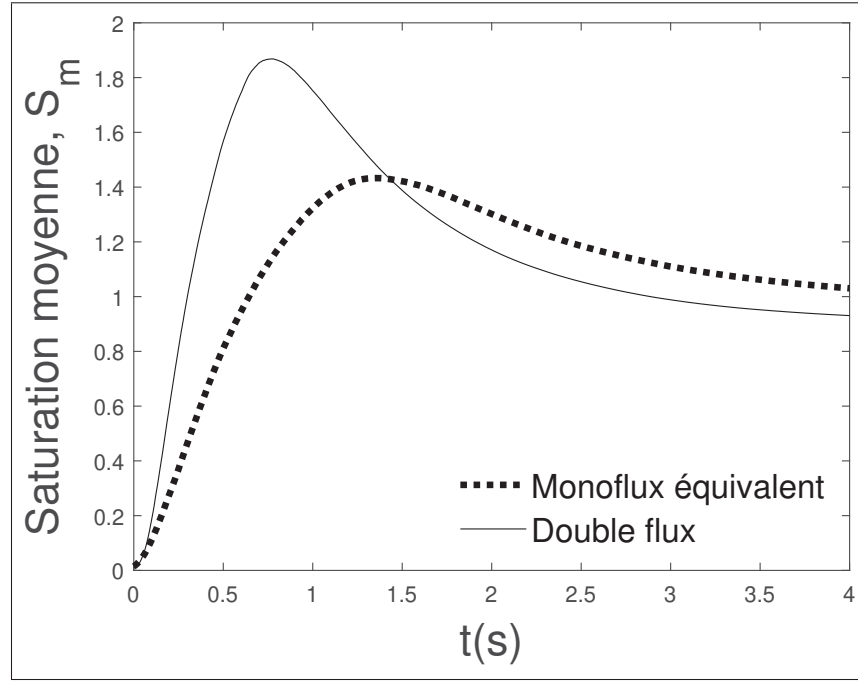


FIGURE 5.6 Évolution temporelle de la saturation moyenne des particules de glace S_m pour les deux configurations : double flux et monoflux équivalent

les différents cas. Dans un premier temps, l'étude de l'énergie cinétique turbulente adimensionnée est effectuée (5.8). Celle-ci est calculée par les transformées de Fourier \hat{u}_i des vecteurs vitesse dans la direction périodique de l'écoulement :

$$E_k = \sum_{k_y} \int_x \int_z \hat{u}_i(x, z, k_y, t) dx dy \quad (5.9)$$

L'intégration en espace est réalisée à l'aide de la méthode des trapèzes. Le nombre de Reynolds étant élevé pour le jet en sortie des trois moteurs, la transition vers la turbulence s'effectue dans les premiers instants de la formation du jet pour les trois cas. L'énergie cinétique atteint sa valeur maximale ($E_k = 0.0423$) à $t = 0,1$ s pour le moteur JT8D contre 0,4 s pour le CFM56 ($E_k = 0.0523$) et $t = 0,5$ s pour le LEAP1A ($E_k = 0.0536$). Il est à remarquer que l'énergie cinétique turbulente est supérieure pour les moteurs CFM56 et LEAP1A par rapport au moteur JT8D tout au long du calcul, i.e lors de la formation des traînées de condensation. Cela montre que la

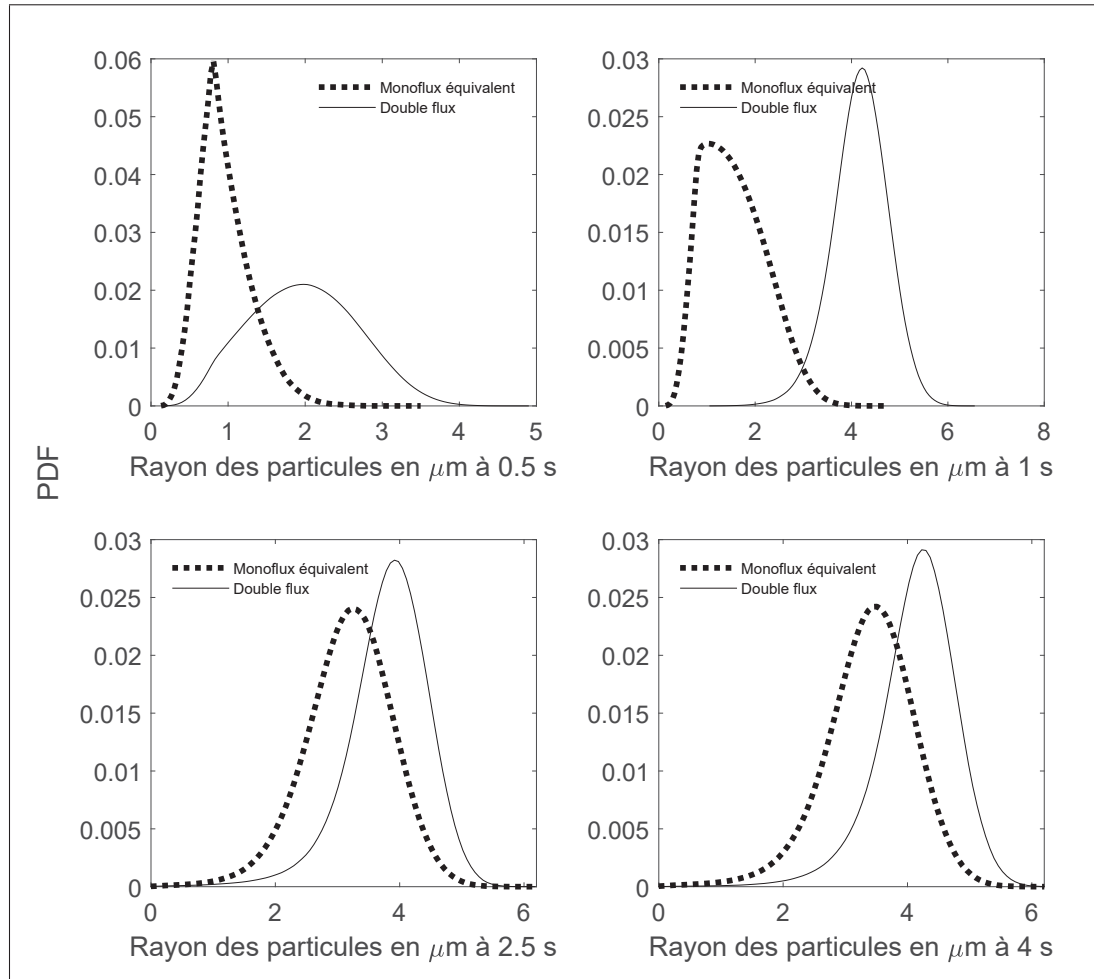


FIGURE 5.7 Distribution des rayons de particules à différents temps après éjection du moteur CFM56 : la ligne pleine représente la configuration avec un double flux et la ligne discontinue représente la configuration avec un monoflux

turbulence dans le jet pour les moteurs CFM56 et LEAP1A est plus importante, indiquant ainsi un mélange plus élevé.

L'épaisseur de quantité de mouvement a été introduite à l'équation 3.2 et représente la perte de quantité de mouvement par rapport au cas d'un écoulement de fluide parfait dans la même configuration. Elle est présentée sur la figure 5.9. Dans l'ensemble du calcul de la formation des traînées de condensation, l'épaisseur de quantité de mouvement est relativement plus faible pour

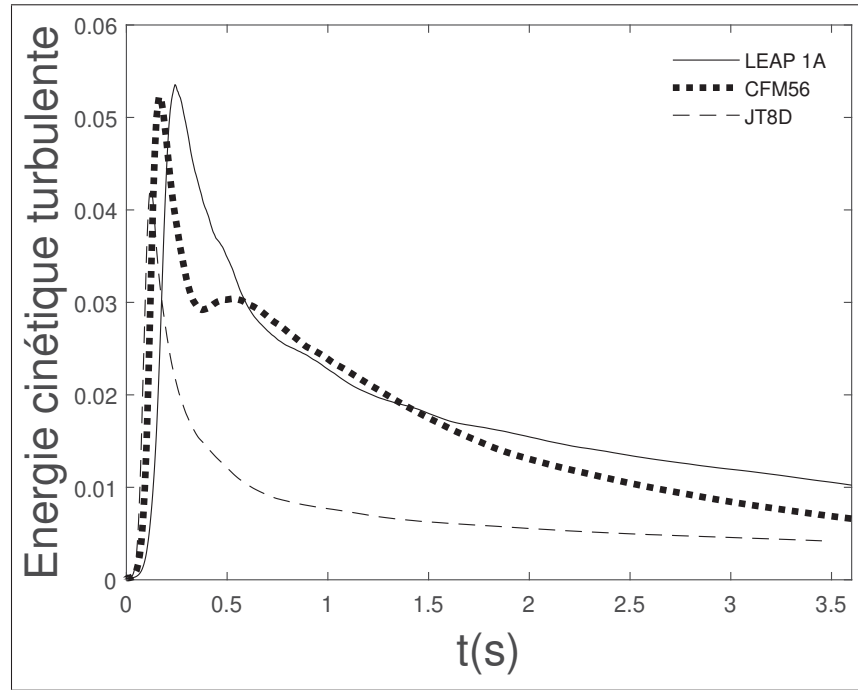


FIGURE 5.8 Évolution temporelle de l'énergie cinétique turbulente pour les trois moteurs

le jet en sortie du moteur JT8D par rapport aux deux autres moteurs (CFM56 et LEAP1A). Cela indique un mélange plus important dans le jet pour les moteurs CFM56 et LEAP1A.

La dilution caractérise le mélange du panache avec l'atmosphère. La dilution est définie comme un scalaire passif qui est égal initialement 1 en sortie de tuyère et 0 dans l'air ambiant (c'est-à-dire l'atmosphère). Ainsi, en sortie de tuyère du réacteur, la dilution vaut 1 puis au cours du calcul et quand le jet chaud se mélange avec l'atmosphère, sa valeur décroît vers 0. La dilution pour les trois moteurs est présentée sur la figure 5.10. La valeur de la dilution est définie par l'équation de convection à diffusion du scalaire passif Z utilisée dans notre modèle :

$$d = \frac{Z}{Z_0} \quad (5.10)$$

Dans le cas du mélange du jet chaud en sortie de tuyère du moteur JT8D, la dilution est égale à 1 jusqu'à 0,2 s puis décroît lentement jusqu'à atteindre une faible valeur (autour de 0) vers 1,5 s.

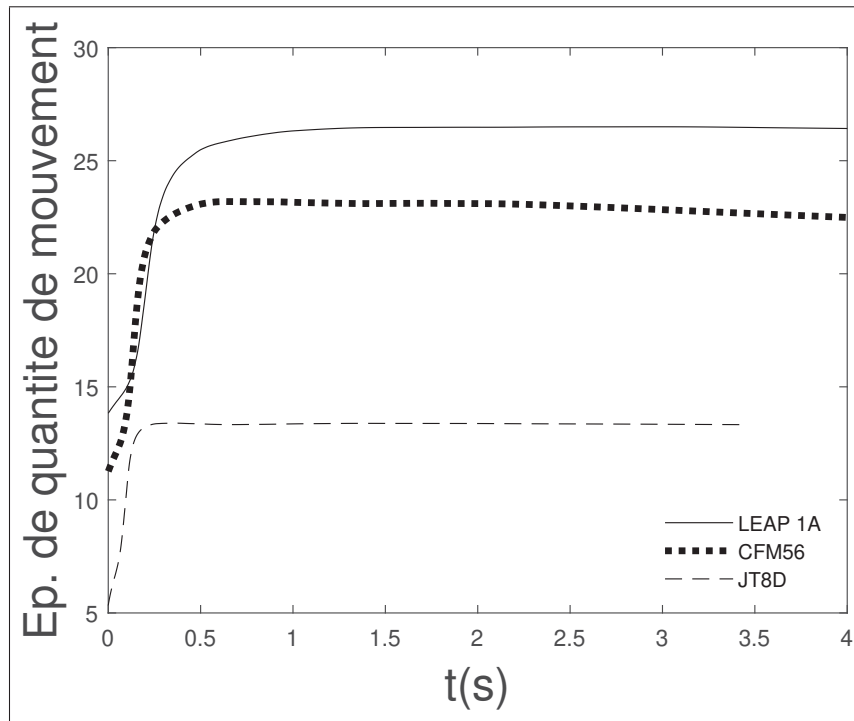


FIGURE 5.9 Évolution temporelle de l'épaisseur de quantité de mouvement pour les trois moteurs

Pour les deux autres moteurs, la décroissance s'établit plus tard, vers 0,4 s pour le CFM56 et 0,5 s pour le LEAP1A. Cela indique que le taux de mélange est plus important pour les deux grands moteurs CFM56 et LEAP1A au début de la formation des traînées de condensation par rapport au JT8D. Ce résultat a un impact direct sur la formation des cristaux de glace, ce qui sera présenté ultérieurement dans la section.

Pour conclure, le champ scalaire de vorticité est montré sur la figure 5.11 pour les moteurs JT8D et LEAP1A à différents temps. Par souci de clarté et de visibilité, seuls ces deux moteurs sont montrés étant donné que les résultats pour le CFM56 sont semblables au LEAP1A en termes de champs scalaires de vorticité. Dans les premiers instants (0,4 s et 0,7 s), le comportement des deux jets en sortie de moteur (i.e JT8D et LEAP1A) est similaire. La transition vers la turbulence n'est pas encore faite. Par la suite, le comportement des deux jets en sortie de tuyère correspond à celui d'un jet turbulent à haut Reynolds tel que mentionné dans le chapitre 3. À 2,5 s et 3,5 s,

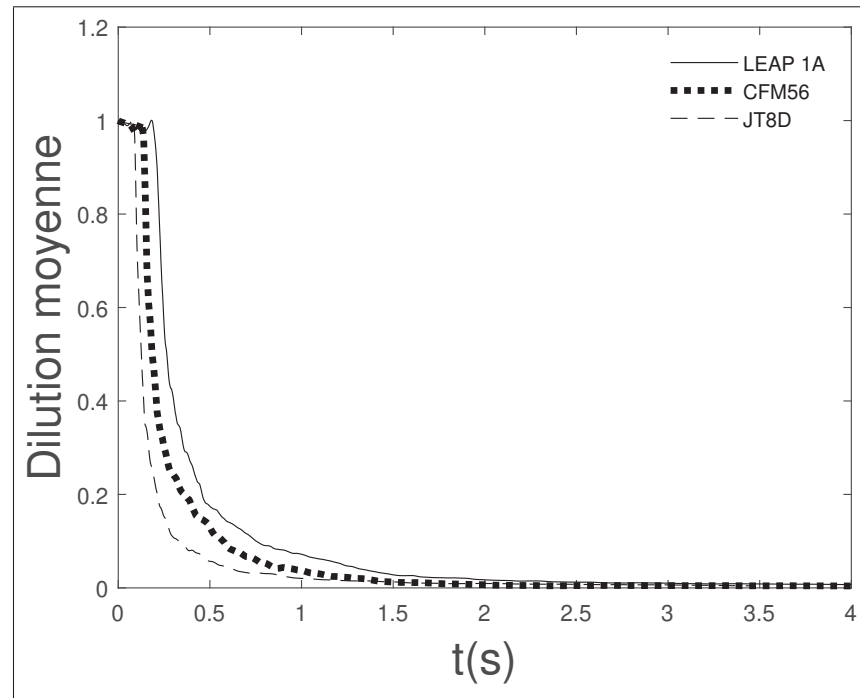


FIGURE 5.10 Évolution temporelle de la dilution moyenne pour les trois moteurs

le comportement des deux jets diffère. Les structures tourbillonnaires sont plus développées à ces instants pour le moteur LEAP1A. De même, le panache se dilue plus rapidement pour le LEAP1A.

Étant donné que les particules de suie et de glace sont considérées comme des traceurs passifs dans l'écoulement du jet (chapitre 4), la dynamique de leur croissance dépend de l'écoulement du jet en sortie de moteur. Ainsi, ces différences sur les grandeurs caractéristiques du jet (énergie cinétique, épaisseur de quantité de mouvement et dilution) en sortie de moteur ont un impact important sur la croissance des particules de glaces et donc sur la formation des traînées de condensation. Ces effets seront discutés dans la section suivante.

Dans un premier temps, pour quantifier l'effet direct du taux de dilution du moteur sur la formation des cristaux de glace, l'évolution temporelle de la saturation moyenne du jet pour les trois moteurs (JT8D, CFM56 et LEAP1A) est montrée sur la figure 5.12. Ce graphe montre que, pour les 3 configurations, la saturation moyenne est similaire, c'est-à-dire que la condensation,

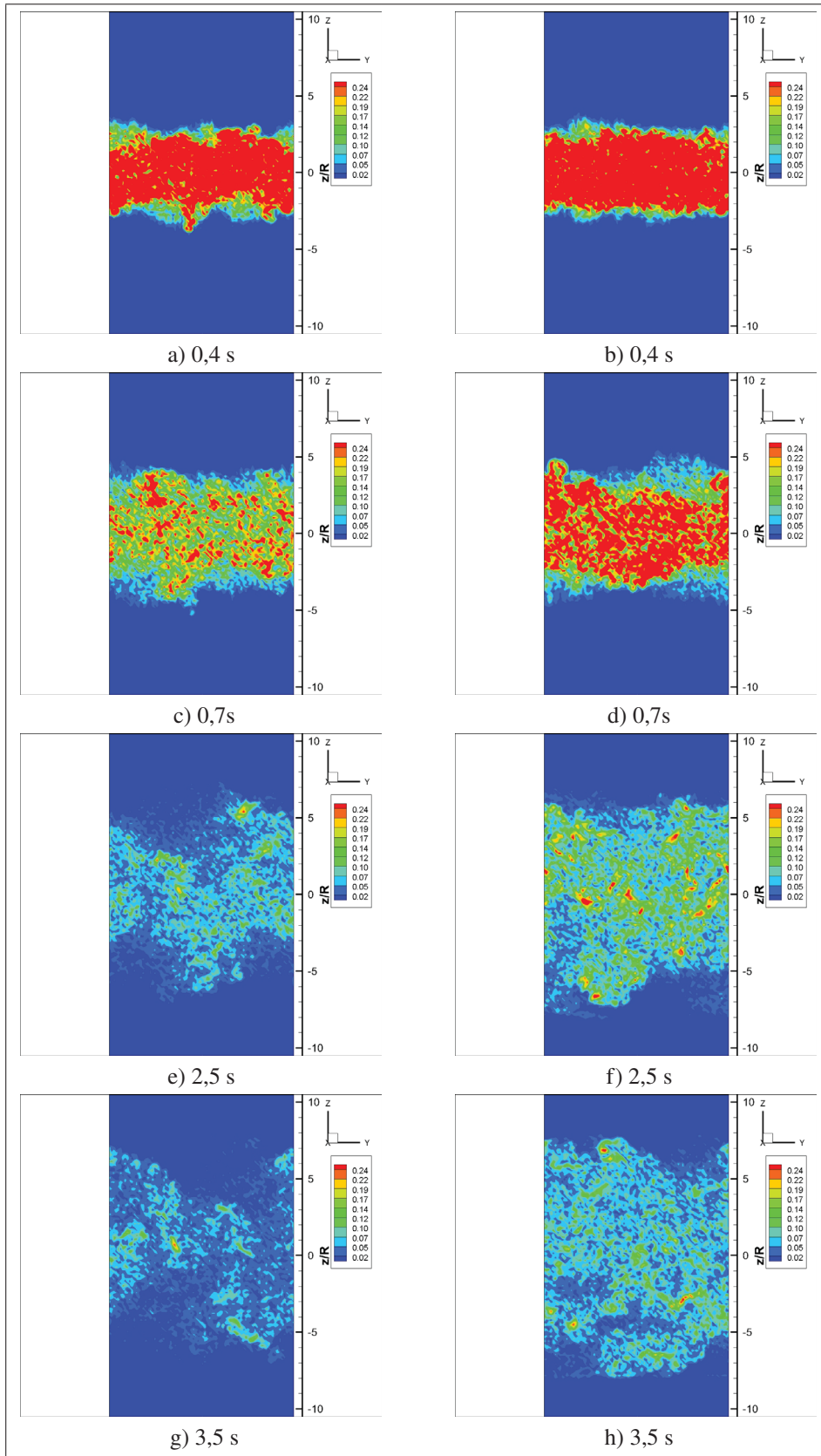


FIGURE 5.11 Champs scalaire de vorticit  adimensionnelle dans le domaine de calcul entre 0,4 et 3,5 s : JT8D   gauche et LEAP1A   droite

pour $S_m > 1$, commence à environ 0,5 s pour les trois cas. La saturation moyenne atteint son maximum à 1 s dans les 3 cas. Il est à remarquer que pour le CFM56 la valeur maximale de saturation moyenne S_m est plus élevée. Puis, la température à l'intérieur du jet chute rapidement en raison de son mélange avec l'air ambiant. Cela a pour conséquence que la saturation moyenne pour les 3 cas décroît et atteint une valeur plateau identique. Ces résultats montrent que le taux de dilution (équation 5.1), et directement le rendement global η , a un impact moindre sur la saturation en eau à la sortie du moteur.

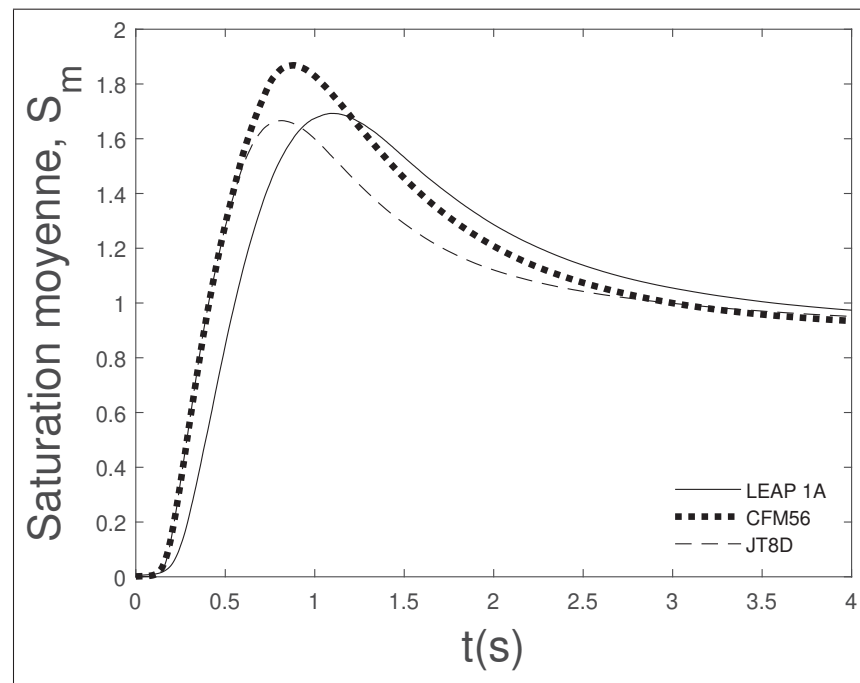


FIGURE 5.12 Évolution temporelle de la saturation moyenne des particules S_m

L'évolution des rayons des particules dépend de plusieurs facteurs qui sont principalement la température du panache, la masse volumique et la taille des particules de suies activées et la fraction molaire de vapeur d'eau présente dans le jet en sortie de moteur. Comme indiqué précédemment, les grandeurs dynamiques du jet influencent l'évolution des cristaux de glace. Pour cela, la figure 5.13 montre la comparaison entre les évolutions du rayon moyen des particules r_m pour les trois cas. Il s'agit dans notre cas d'une moyenne temporelle sur l'ensemble des particules dans le domaine de calcul. Le graphe 5.13 montre que, pour les trois moteurs, le rayon

moyen des particules augmente en sortie de tuyère en raison du refroidissement du panache. Puis un point d'inflexion apparaît à un temps d'environ $t = 1,5$ s (idem pour les trois moteurs), suggérant un début de stabilisation du rayon moyen des particules. Les résultats suggèrent qu'une différence de taux de dilution, donc du rendement global, influence considérablement les rayons des particules avec une différence de 20 % entre le moteur avec un taux de dilution plus élevé (i.e LEAP1A) et le moteur ayant un taux de dilution plus faible (i.e JT8D), avec un rayon moyen maximum égal à $r_m = 4 \mu\text{m}$ pour le cas à taux de dilution élevée et $r_m = 3,1 \mu\text{m}$ pour le cas à taux de dilution basse. Mais la différence sur les rayons moyens des particules entre le moteur LEAP1A avec un taux de dilution de 10,5 et le moteur CFM56 avec un taux de dilution égal à 6 est relativement faible (environ 4 %). Cela est dû, d'après Schumann (2000b), au fait que les moteurs avec des rendements proches (0,4 pour le CFM56 et 0,5 pour le LEAP1A) auront approximativement le même impact sur la formation des traînées de condensation.

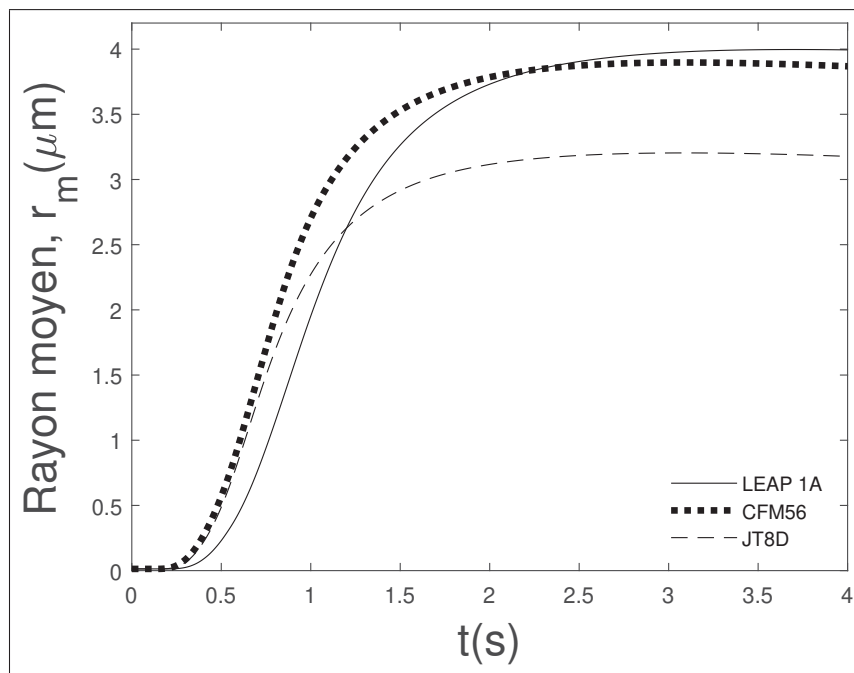


FIGURE 5.13 Évolution temporelle du rayon moyen des particules r_m

Par la suite, les distributions en taille des particules à différents temps sont tracées sur la figure 5.14. Comme indiqué dans la section précédente, la valeur de la PDF à un rayon r_m donne la

probabilité d'avoir un rayon de particules à un temps donné. Ainsi, dans les premiers temps après la sortie du jet en la sortie du moteur, la grande majorité des particules correspondent à des particules de suie sèches. Puis, de la vapeur d'eau se dépose sur les particules, réduisant ainsi les valeurs des PDF pour les rayons les plus petits, et les augmentant pour les rayons élevés (au temps $t = 0, 7$ s pour les trois moteurs). Aux temps suivants, la PDF se rapproche d'une distribution gaussienne, ce qui signifie une polydispersité du rayon des cristaux de glace. Enfin, le tracé des distributions en taille des particules à $t = 3,5$ s et $4,5$ s montrent que les rayons maximaux atteints par les deux moteurs à grands taux de dilution sont beaucoup plus élevés par rapport au JT8D. La figure 5.14 montre que l'augmentation du taux de dilution conduit à des particules plus grosses. L'effet reste toutefois modéré lorsque le rendement global est proche entre deux moteurs (Schumann (2000b)).

La visibilité d'une traînée de condensation peut être évaluée par le calcul de l'épaisseur optique τ , qui mesure le degré de transparence d'un milieu. Une traînée de condensation est visible pour $\tau > 0,03$ (Kärcher *et al.* (1996)). La Figure 5.15 montre la comparaison de l'évolution temporelle de l'épaisseur optique pour les trois moteurs. Le seuil de visibilité $\tau > 0,03$ est atteint à environ $0,8$ s après éjection du moteur. L'épaisseur maximale obtenue est de $0,26$ ce qui correspond à la valeur obtenue dans l'étude de Paoli *et al.* (2013b). Par la suite, les résultats montrent que le taux de dilution a un impact direct sur la valeur de l'épaisseur optique. Les tendances des trois courbes sont identiques et l'écart maximal est de 50% . Cet écart reste identique plus en aval dans le sillage de l'avion. Puis, avec un taux de dilution élevé, le jet en sortie de moteur est susceptible de produire des traînées plus visibles. Ces résultats restent cohérents avec les résultats obtenus par Schumann (2000b); Schumann *et al.* (2000). Un moteur avec un rendement global plus élevé conduit à la formation de traînées de condensation plus visible par rapport à un moteur avec un rendement moindre.

Finalement, la masse totale de glace liée à la croissance des particules de glace, définie par $m_p = \sum_p \frac{4}{3} \pi r_p^3 \rho_p$, où r_p est le rayon des particules et ρ_p est la masse volumique des particules, est représentée sur la figure 5.16. La comparaison de la masse des particules montre des tendances très similaires avec les résultats précédents (rayon des particules, épaisseurs optiques). La figure

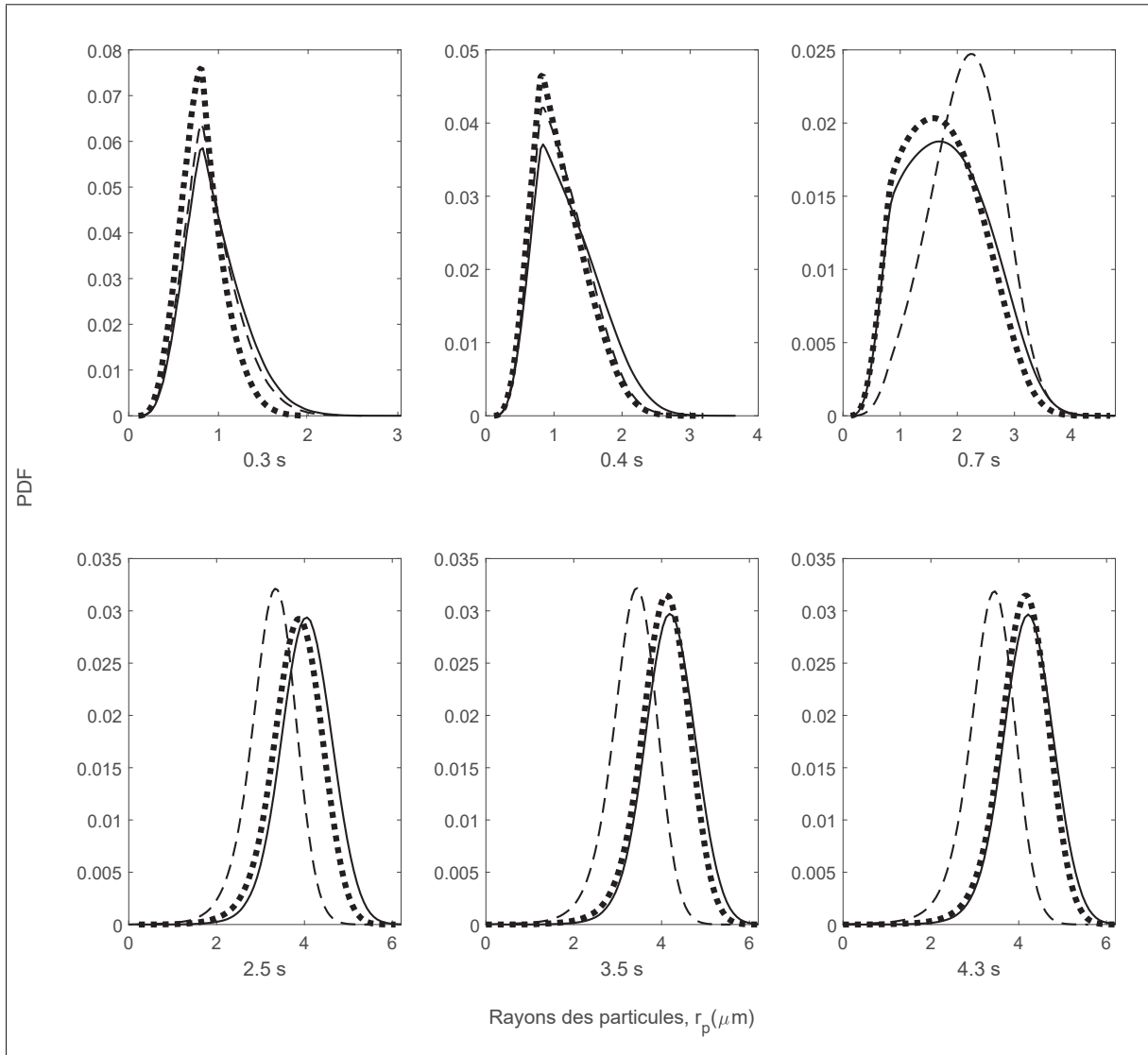


FIGURE 5.14 Distribution des rayons de particules à différents temps après éjection pour les trois moteurs : la ligne pleine représente le moteur LEAP1A, la ligne discontinue en gras représente le moteur CFM56 et la ligne discontinue représente le moteur JT8D

5.16 montre que l'augmentation du taux de dilution conduit également à des particules de glace ayant une masse plus importante. Les différences sont observables à 1 s après émission du jet en sortie de moteur. Par la suite, le moteur ayant un taux de dilution élevé (LEAP1A), par rapport à un moteur ayant un faible taux de dilution (JT8D), produit des particules ayant une masse plus importante (deux fois plus grand, avec la même altitude et les mêmes conditions ambiantes). Par

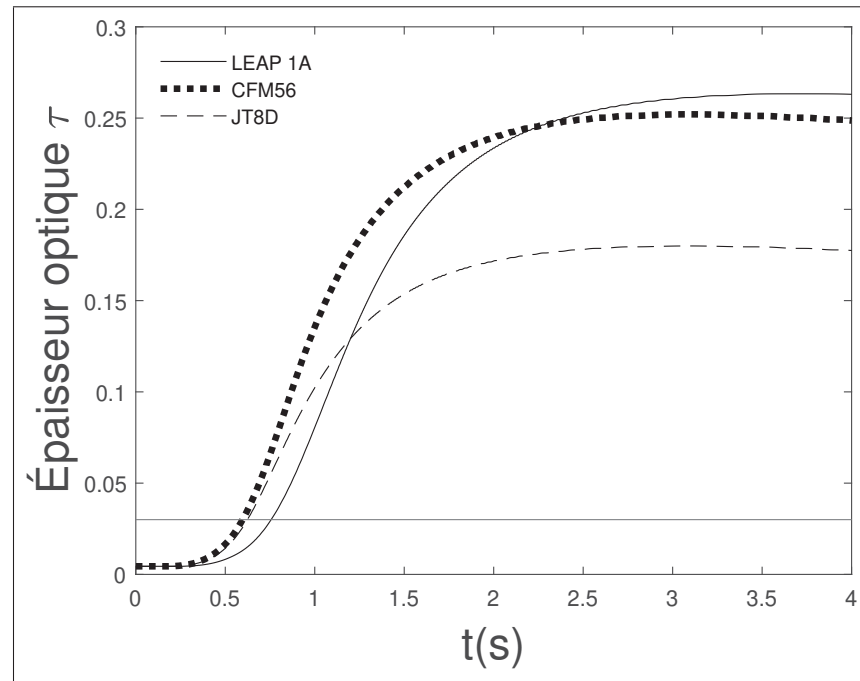


FIGURE 5.15 Évolution temporelle de l'épaisseur optique τ

contre, la même remarque que pour les rayons des particules sont à émettre, pour deux moteurs ayant un rendement proche (LEAP1A et CFM56), l'évolution de la masse des particules est sensiblement les mêmes. La différence pour la masse des particules est d'environ 5 % entre les deux moteurs.

La distribution des particules dans les traînées de condensation est principalement due à l'évolution inhomogène des variables thermodynamiques locales utilisées dans le modèle de Fukuta & Walter (1970) exprimée par les équations 2.18 et 2.21. Ce comportement inhomogène dans le panache est illustré à la figure 5.17. Les distributions spatiales des cristaux de glace (en blanc) et des particules de suie sèches (en noir) sont tracées sur une coupe des isovaleurs de la température du jet à 0,25 s. Les résultats présentés ici concernent le moteur LEAP1A et le JT8D. Les résultats des figures 5.17a et 5.17c montrent que les cristaux de glace se forment, dans les premiers instants, à la périphérie du panache où le mélange entre l'air ambiant et le jet chaud favorise la condensation de la vapeur d'eau pour les deux moteurs. À cette étape, la température

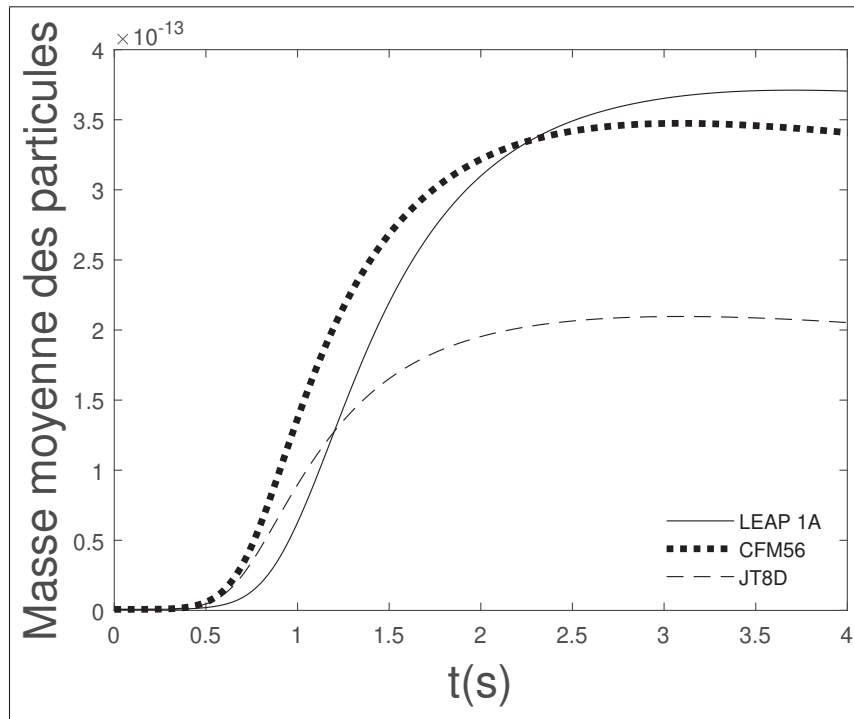


FIGURE 5.16 Évolution temporelle de la masse moyenne des particules m_p

du jet est passée de 440 K à 290 K dans le cœur du jet, où les particules de suie sèches sont concentrées.

5.5 Bilan du chapitre

L'étude de l'évolution temporelle d'un jet de moteur composé d'espèces miscibles, d'air, de vapeur d'eau et de particules solides (suie et glace) est basée sur l'approche de simulation des grandes échelles (LES). La phase gazeuse est régie par les équations de Navier-Stokes compressibles, ainsi que par une équation de transport pour la vapeur d'eau. La phase solide est traitée en utilisant une approche lagrangienne, avec un modèle microphysique. Dans ce chapitre, l'influence d'un ajout d'un double flux est d'abord étudiée, puis l'effet du taux de dilution du moteur est analysé. Les deux études sont réalisées avec des conditions de vol de croisière pour favoriser la formation des traînées de condensation.

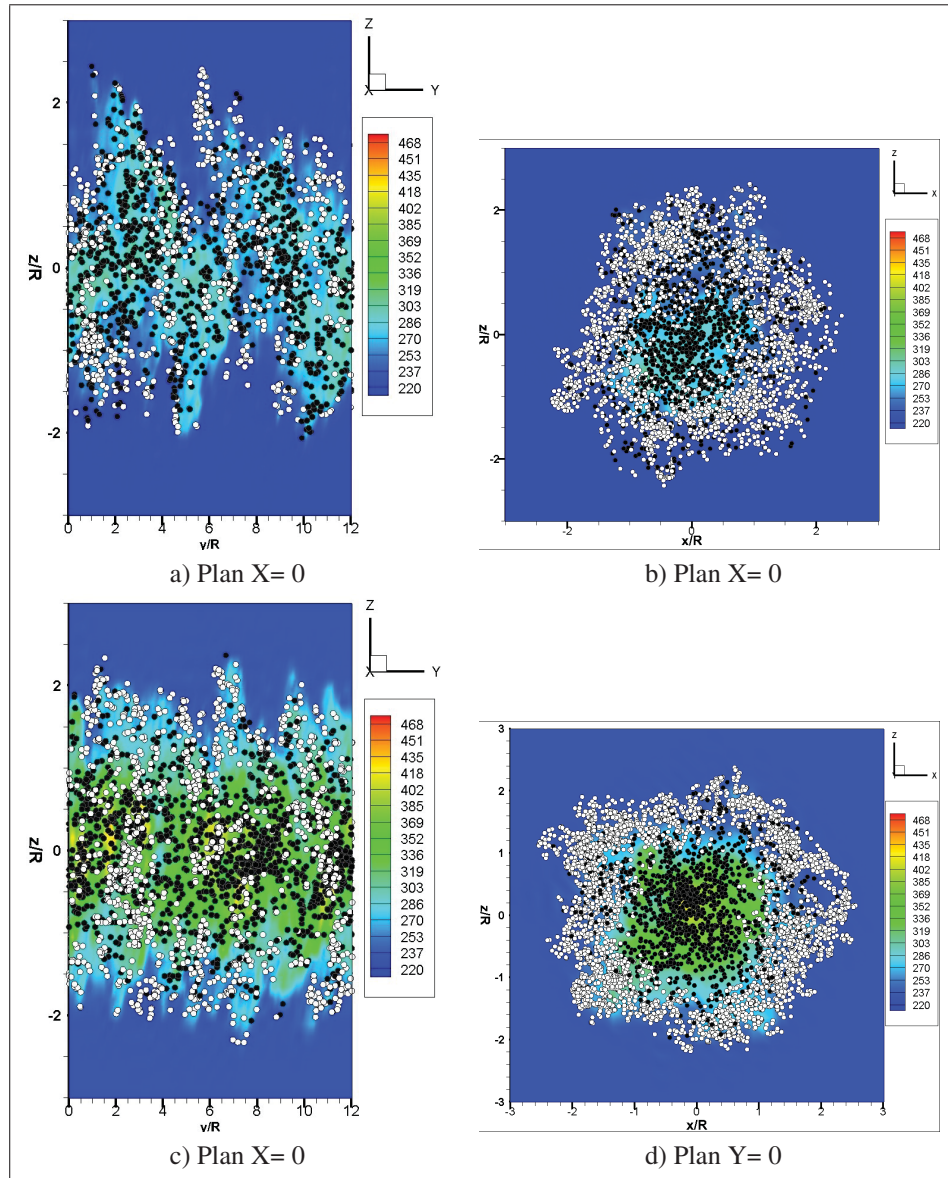


FIGURE 5.17 Champs scalaire de température dans le domaine de calcul pour les deux moteurs JT8D en haut et LEAP1A en bas avec particules de suies (point noir) et particules de glaces (point blanc)

Premièrement, les études menées jusqu'à présent sur la simulation numérique de la formation des traînées de condensation considéraient le jet en sortie de tuyère comme un flux unique (monoflux équivalent). Voulant déterminer si cette hypothèse suffit à retranscrire les situations d'un avion en situation de croisière, une étude comparative a été faite sur la formation et la croissance des

particules avec deux jets en sortie de moteur, dont un avec un double flux et un autre avec un monoflux. Le but est de mettre en évidence l'effet du flux secondaire sur la formation des traînées de condensation. Les résultats montrent que si la vitesse du flux secondaire n'est pas égale à la vitesse du flux primaire (vitesse au cœur du jet), un impact non négligeable sur la croissance des particules est remarqué. En effet, le temps de croissance d'une particule à sursaturer pour la configuration où la vitesse entre le flux primaire et le flux secondaire est inégale est deux fois plus élevé que celui déterminé dans une configuration où les vitesses du flux primaire et secondaire sont égales. Cela est dû à une couche de mélange plus petite lorsque les vitesses en sortie de moteur sont inégales. De plus, avec la configuration avec un double flux, le rayon moyen des particules est plus élevé, mais la distribution moyenne du rayon des particules est plus dispersée dans cette configuration. De plus, la distribution du rayon des particules se rapproche d'un profil gaussien, qui indique la polydispersion du rayon des cristaux de glace dans les deux cas.

Ensuite, la formation des particules de glace à la sortie de la tuyère pour trois moteurs avec différents taux de dilution est étudiée. L'analyse montre que le taux de dilution a une influence sur la croissance des particules. Cela suggère que l'augmentation du taux de dilution conduit à une épaisseur optique plus élevée, ce qui rend les traînées plus visibles. Ces résultats sont cohérents avec les résultats obtenus par Schumann (2000b) ; Schumann *et al.* (2000). De plus, avec un taux de dilution plus élevé, le rayon des particules est plus grand par rapport au cas avec un taux de dilution plus faible. En conséquence, la masse de particules est plus importante avec un taux de dilution plus élevé. Cependant, pour deux moteurs avec deux taux de dilution différents, mais avec un rendement global proche, les résultats montrent un comportement de croissance des particules, en ce qui concerne l'épaisseur optique et le rayon de particules, proche.

La simulation présentée dans ce chapitre ne donne pas d'estimation précise sur la formation de la traînée de condensation, mais vise à servir de première étape et de base pour des simulations numériques plus avancées qui prennent en compte la dynamique de sillage et les aérosols.

CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Les études effectuées au cours de cette thèse ont permis une meilleure compréhension de la formation et de la croissance des cristaux de glace dans le champ proche derrière le moteur de l'avion. Cela a été fait par la mise en place d'un modèle numérique capable de modéliser le panache en sortie de moteur, mais aussi aux premières simulations spatiales permettant la résolution, à la fois la dynamique du jet en sortie de moteur d'un avion en vol de croisière, mais également des processus microphysiques de croissance des cristaux de glace qui y prennent place.

La première partie présente la modélisation mathématique de la dynamique du jet en sortie de tuyère ainsi que la modélisation microphysiques et les méthodes numériques utilisées. Le code numérique pour la simulation de mécanique des fluides FLUDILES a été utilisé. De plus un modèle permettant de décrire les principaux processus microphysiques basés sur la méthode de Fukuta-Walter a été utilisé. Dans un premier temps, l'écoulement à la sortie du jet décrit par les équations de Navier-Stokes est modélisé par un schéma de différence fini d'ordre 6 pour les termes convectifs. Puis, dans le cadre de la modélisation des particules, leur position et leur taille sont calculées respectivement par une méthode lagrangienne et leur croissance grâce au modèle mathématique de Fukuta-Walter. Il est remarqué qu'une partie de l'étude en amont consistait à mettre en parallèle le code FLUDILES avec les bibliothèques OpenMP et MPI. Cette étape permet un gain de temps pour les simulations spatiales. Tout cela est complété par une validation des résultats obtenus par la parallélisation.

La deuxième partie est articulée sur trois chapitres : la validation de l'outil de simulation pour un jet spatial turbulent, l'étude de la formation d'une traînée de condensation et enfin une étude de sensibilité pour évaluer l'influence des paramètres d'un moteur d'avion commercial sur les propriétés de la traînée de condensation.

La validation de l'outil numérique FLUDILES a été effectuée en simulant un jet turbulent (à haut nombre de Reynolds) sortant dans un fluide (ici de l'air au repos). Le domaine de calcul étudié s'étend plus de 72 fois le rayon du jet permettant ainsi d'étudier les phénomènes intervenant au début du régime jet. Les résultats numériques obtenus ont été comparés à des résultats expérimentaux et numériques de la littérature en termes de :

- Moyennes temporelles et instantanées pour le jet rond
- Tenseur de Reynolds d'ordre 2
- Topologie du jet

Les résultats montrent que les profils de la vitesse moyenne sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. De plus, les moments de second ordre ont aussi montré de bons ordres de grandeur ainsi qu'une bonne correspondance avec les résultats obtenus expérimentalement. Ensuite, le spectre d'énergie cinétique turbulente de la vitesse axiale a montré la similarité avec la cascade d'énergie de Kolmogorov pour une partie des échelles turbulente. Cela démontre ainsi une bonne résolution sur le choix du maillage et du schéma numérique pour modéliser le jet turbulent. Par la suite, une validation qualitative a été faite. Par conséquent, le champ de vorticit  et les isosurfaces de pression et densit  ont  t  pr sent s. Ces derniers ont montr  les caract ristiques du jet rond turbulent, ce qui permet la validation qualitative de la turbulence du jet rond turbulent. Une  tude approfondie de ces structures par le biais du crit re Q et λ_2 a montr  la pr sence d'anneau de vorticit  et de ligament tourbillonnaire dans le jet, caract ristique d'un jet turbulent. Ceci permet d'illustrer la capacit  du code FLUDILES   simuler un jet spatial turbulent.

Cette  tape de validation est importante, car elle permet au code num rique FLUDILES d' tre utilis e pour la suite des travaux, afin de mieux comprendre le m canisme de la formation des tra n es de condensation.

Puis, la suite de l'étude vise à mettre en place d'une simulation numérique sur la formation d'une traînée de condensation à une altitude de vol, avec un moteur CFM56 incluant les processus microphysiques de croissance des cristaux de glace. Ceci permet d'avoir un calcul de référence sur les premiers instants de vie d'une traînée de condensation. Pour comprendre ce processus, un jet d'air turbulent à la sortie d'un moteur CFM56 avec des particules de suies a été modélisé. Les particules de suies en présence de la vapeur d'eau en sortie de moteur et dans des conditions de sursaturation, deviennent des cristaux de glace. Ces particules sont traquées par une méthode lagrangienne tandis que le fluide est modélisé par une méthode eulérienne.

Les premiers résultats ont été principalement consacrés à l'interaction jet/particules. Cette étape a permis d'observer le caractère passif des particules de suies/cristaux de glace dans le jet turbulent et aussi de voir l'impact de la dynamique du jet sur les particules. Ce dernier influence grandement la formation et la dynamique des cristaux de glace. Par la suite, l'étude se consacre à la formation des cristaux de glace dans le sillage de l'avion. Les premiers résultats montrent que les premiers cristaux de glace se forment premièrement dans la périphérie du jet. Ce résultat est en cohérence avec la littérature. Ils indiquent que les cristaux de glace se forment en premier lieu à la périphérie du jet, dans les zones froides. Ensuite, l'étude a montré que les particules de grandes tailles se forment en aval du jet. Cela est du fait qu'à cet emplacement, la température du jet d'air a atteint la valeur de la température de l'air ambiant, favorisant ainsi la croissance des cristaux de glace. Enfin, les résultats sur l'épaisseur optique montrent un bon accord en terme d'ordre grandeur avec les résultats obtenus dans la littérature. Elle atteint une valeur maximale de $\tau = 0,34$ contre 0,7 pour Khou (2016) et 0,27 Paoli *et al.* (2013b). Cette deuxième partie de la thèse a permis de confirmer le potentiel de l'outil numérique FLUDILES à modéliser les premiers instants de vie d'une traînée de condensation.

La dernière partie des résultats consiste en une étude de sensibilité pour évaluer l'influence du taux de dilution du moteur sur les propriétés de la traînée de condensation formée. Les

paramètres étudiés correspondent à l'influence d'un ajout d'un flux secondaire au jet en sortie de moteur et l'effet du taux de dilution. Ces deux études sont réalisées avec des conditions de vol de croisière. Ainsi, la première partie de l'étude a été consacrée à la mise en évidence de l'effet du flux secondaire sur la formation des traînées de condensation. Ce dernier étant négligé dans la plupart des études sur la simulation numérique de la formation des traînées de condensation. Les résultats ont montré que la prise en compte de la vitesse du flux secondaire a un impact sur la formation des particules de glaces et leur croissance. En effet, le temps de croissance d'une particule à sursaturer est deux fois plus élevé. Cela est dû à une épaisseur radiale plus petite lorsque les vitesses en sortie de moteur sont inégales. De plus, avec un moteur avec un double flux, le rayon moyen des particules est plus élevé, mais la distribution moyenne du rayon des particules est plus dispersée dans cette configuration.

Par la suite, l'analyse est faite pour trois moteurs avec des taux de dilution différents. L'étude a montré que les différents taux de dilution ont une influence sur la croissance des particules. Cela suggère que l'augmentation du taux de dilution conduit à une épaisseur optique plus élevée (0,27 pour le LEAP1A et 0,1 pour le JT8D), ce qui rend les traînées plus visibles. Par la suite, avec un taux de dilution haut, le rayon des particules est plus élevé ($4\ \mu m$) par rapport au cas avec un taux de dilution plus bas ($3,1\ \mu m$). En conséquence, la masse de particules est plus importante pour un moteur avec un taux de dilution plus élevé. Par contre, il est à remarquer que pour deux moteurs avec deux taux de dilution différents, mais avec un rendement global semblable (0,4 pour le CFM56 et 0,5 pour le LEAP1A), l'analyse a montré un comportement de croissance des particules proche tant pour la profondeur optique que pour l'évolution du rayon de particules de glace.

Pour conclure, les simulations présentées dans cette thèse donnent une bonne estimation de la formation des traînées de condensation, et visent à servir de première étape, ainsi que de mitigation et de base pour des simulations numériques plus avancées qui prennent en compte la

dynamique de sillage et les aérosols. De manière générale, pour améliorer la précision de la prédiction des propriétés de la formation des traînées de condensation, un modèle microphysique plus enrichie pourrait potentiellement être implantés dans le code FLUDILES. Une première amélioration serait de mettre en place un modèle de chimie. Puis il serait par exemple intéressant d'inclure l'interaction des aérosols (acide sulfurique) sur la croissance des particules. Par ailleurs, il serait également intéressant d'améliorer la parallélisation de la partie MPI du code. Dû à la présence d'erreur informatique, il est présentement impossible de faire des calculs numériques spatiaux avec la bibliothèque MPI. Les travaux futurs se pencheront donc sur la correction et l'implémentation de la partie spatiale avec la bibliothèque MPI. Cela dans le but de faire des calculs sur de plus grand domaine en moins de temps.

ANNEXE I

GRANDEURS THERMODYNAMIQUES

Constante des gaz parfaits

$$R = 8,314 \text{ J.mol}^{-1} . K^{-1}$$

Masse molaire de l'eau

$$M_a = 28,964.10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1}$$

Masse molaire de l'air

$$M_v = 18,015.10^{-3} \text{ kg.mol}^{-1}$$

Constante des gaz parfaits par unité de masse

$$r_a = 287,06 \text{ J.kg}^{-1} . K^{-1}$$

Conductivité thermique

$$K_g = (5,59. 10^{-5} + (T - 273,15) . 0,017.10^{-5}).4,18.100 \text{ en W.m}^{-1} . K^{-1}$$

Diffusivité de la vapeur

$$D_v = (0,211 . (\frac{T}{273,15})^{1,94} . \frac{1,013.10^5}{P_g}) . 10^{-4} \text{ en m}^2 . s^{-1}$$

ANNEXE II

LES ÉQUATIONS FILTRÉES

les différentes étapes nécessaires à l'obtention des équations filtrées utilisées en simulation des grandes échelles sont présentées dans les sections suivantes.

1. Équation de continuité

L'équation de continuité s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (\text{A II-1})$$

Le filtrage en fréquence appliqué à cette dernière équation donne :

$$\overline{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j)} = 0 \quad (\text{A II-2})$$

Ce qui, en faisant appel aux deux propriétés de linéarité et de commutativité avec la dérivation, peut se réécrire :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (\text{A II-3})$$

Enfin en utilisant la définition du filtrage de Favre qui, rappelons-le s'écrit :

$$\overline{\rho f} = \bar{\rho} \tilde{f} \quad (\text{A II-4})$$

On arrive à :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) \quad (\text{A II-5})$$

2. Équation de quantité de mouvement

L'équation de quantité de mouvement s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A II-6})$$

Le filtrage en fréquence appliqué à cette dernière équation donne :

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} = 0 \quad (\text{A II-7})$$

Ce qui, en faisant appel aux deux propriétés de linéarité et de commutativité avec la dérivation, peut se réécrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A II-8})$$

Soit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_j}) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-9})$$

En utilisant la définition du filtrage de Favre, il vient :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} (u_i u_j)^\sim] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-10})$$

En posant :

$$\tau_{ij} = \bar{\rho} \{ (u_i u_j)^\sim - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \} \quad (\text{A II-11})$$

Et

$$\hat{\sigma}_{ij} = \frac{\mu(\tilde{T})}{Re} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \quad (\text{A II-12})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij}} - \hat{\sigma}_{ij}) \quad (\text{A II-13})$$

3. Équation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (E + p) u_j - \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A II-14})$$

Le filtrage en fréquence appliqué à cette dernière équation donne :

$$\overline{\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (E + p) u_j - \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) + \frac{\partial q_j}{\partial x_j}} = 0 \quad (\text{A II-15})$$

Ce qui, en faisant appel aux deux propriétés de linéarité et de commutativité avec la dérivation, peut se réécrire :

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(E + p) u_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) + \frac{\partial \bar{q}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A II-16})$$

En posant :

$$B_7 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{q_j} - \hat{q_j}) \quad (\text{A II-17})$$

Et

$$\hat{q_j} = - \frac{\mu(\tilde{T})}{(\gamma - 1) Re Pr M_0^2} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-18})$$

On a :

$$\frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{E + p} u_j) + \frac{\partial \hat{q_j}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 \quad (\text{A II-19})$$

Ce qui peut se réécrire :

$$\frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{E u_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j}) + \frac{\partial \hat{q_j}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 \quad (\text{A II-20})$$

En posant :

$$\hat{E} = \frac{\overline{p}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \overline{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \quad (\text{A II-21})$$

On obtient :

$$\frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j}) + \frac{\partial \hat{q_j}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 + \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{E u_j}) \quad (\text{A II-22})$$

On sait que :

$$\hat{E} \tilde{u}_j = \frac{\overline{p}}{\gamma - 1} \tilde{u}_j + \frac{1}{2} \overline{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (\text{A II-23})$$

Et

$$\overline{Eu_j} = \frac{\overline{p}}{\gamma - 1} u_j + \frac{1}{2} \overline{\rho u_i u_i u_j} \quad (\text{A II-24})$$

Avec :

$$B_1 = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j} - \overline{p} \tilde{u}_j) \quad (\text{A II-25})$$

On obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{Eu_j}) = -B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \quad (\text{A II-26})$$

L'équation A II-22 prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j}) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \end{aligned} \quad (\text{A II-27})$$

Soit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j}) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\rho u_i u_i u_j}) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j} - \overline{p} \tilde{u}_j) \end{aligned} \quad (\text{A II-28})$$

En posant :

$$B_2 = \overline{p \frac{\partial u_k}{\partial x_k}} - \overline{p} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad (\text{A II-29})$$

On obtient :

$$-\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p u_j} - \overline{p} \tilde{u}_j) = -B_2 - u_j \overline{\frac{\partial p}{\partial x_j}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-30})$$

D'où :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{E} \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{p} \tilde{u}_j) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i}) - B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\rho u_i u_i u_j}) - B_2 - u_j \overline{\frac{\partial p}{\partial x_j}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (\text{A II-31})$$

Ce qui peut se réécrire :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\hat{E} + \overline{p}) \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = -B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \\ - B_2 - u_j \overline{\frac{\partial p}{\partial x_j}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} u_i} - \hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) \end{aligned} \quad (\text{A II-32})$$

En posant :

$$B_6 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij} \tilde{u}_i} - \hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) \quad (\text{A II-33})$$

On obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma_{ij}u_i} - \hat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) = B_6 + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma_{ij}u_i} - \overline{\sigma_{ij}}\tilde{u}_i) \quad (\text{A II-34})$$

Avec :

$$B_5 = \overline{\sigma_{kj} \frac{\partial}{\partial x_j} u_k} - \overline{\sigma_{kj}} \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{u}_k \quad (\text{A II-35})$$

On a :

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma_{ij}u_i} - \overline{\sigma_{ij}}\tilde{u}_i) = B_5 + u_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-36})$$

D'où :

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma_{ij}u_i} - \hat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) = B_6 + B_5 + u_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-37})$$

L'équation A II-32 devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}((\hat{E} + \overline{p})\tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\hat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = -B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \\ - B_2 - u_j \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \tilde{u}_j \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + B_6 + B_5 + u_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (\text{A II-38})$$

Soit :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\hat{E} + \bar{p}) \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\
= -B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \\
- B_2 - \overline{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + B_6 + B_5 + \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \\
+ \frac{\partial \hat{E}}{\partial t} - \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} \quad (\text{A II-39})
\end{aligned}$$

Avec :

$$\hat{E} = \frac{\bar{p}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \quad (\text{A II-40})$$

Il est montré que :

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{1}{2} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-41})$$

Et

$$\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} - \frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_j u_j}) + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{1}{2} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-42})$$

L'équation A II-39 prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \hat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\hat{E} + \bar{p})\tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\
= -B_7 - B_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \overline{\rho u_i u_i u_j}) \\
- B_2 - \overline{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + B_6 + B_5 + \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \\
\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_j u_j}) + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{1}{2} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-43})
\end{aligned}$$

Ensuite :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \frac{1}{2} \tilde{u}_j \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (\text{A II-44})$$

De plus, d'après l'équation de quantité de mouvement filtrée

$$\tilde{u}_j \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \tilde{u}_i \frac{\partial \hat{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} = -\tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\sigma_{ij}} - \hat{\sigma}_{ij}) \quad (\text{A II-45})$$

Soit :

$$\tilde{u}_j \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} = -\tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-46})$$

En posant :

$$B_3 = \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{kj} \tilde{u}_k) \quad (\text{A II-47})$$

Et

$$B_4 = \tau_{kj} \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{u}_k \quad (\text{A II-48})$$

On a :

$$B_4 - B_3 = -\tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-49})$$

Soit :

$$B_4 - B_3 = -\tilde{u}_i \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \tilde{u}_j \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \tilde{u}_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{\sigma_{ij}}}{\partial x_j} \quad (\text{A II-50})$$

L'équation A II-42 prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\hat{E} + \bar{p}) \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{\sigma}_{ij} \tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = -B_1 - B_2 - B_3 + B_4 + B_5 + B_6 - B_7 \\ + \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho u_i u_i u_j} + \overline{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_j u_j}) \end{aligned} \quad (\text{A II-51})$$

Par la suite :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j u_j) = u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{1}{2} u_j u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-52})$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_i u_j) = \frac{1}{2} u_j u_i \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \rho u_j u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-53})$$

D'où :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j u_j) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_i u_j) = u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{1}{2} u_j u_j \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \rho u_i u_j \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (\text{A II-54})$$

Soit :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j u_j) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_i u_j) = u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + u_j \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j} \quad (\text{A II-55})$$

Ou

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_j u_j}) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{\rho u_i u_i u_j}) = \overline{u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial t}} + \overline{u_j \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j}} \quad (\text{A II-56})$$

Ce qui fait :

$$\begin{aligned} \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\rho u_i u_i u_j} + \overline{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_j u_j}) \\ = \overline{u_j \frac{\partial \rho u_j}{\partial t}} + \overline{u_j \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_j}} + \overline{u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}} + \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} \end{aligned} \quad (\text{A II-57})$$

Or, on a :

$$u_i \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + u_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} - u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{A II-58})$$

Soit :

$$\overline{u_i \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i)} + \overline{u_i \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j)} + \overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}} - \overline{u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}} = 0 \quad (\text{A II-59})$$

Finalement, on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\hat{E} + \bar{p})\tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\hat{\sigma}_{ij}\tilde{u}_i) + \frac{\partial \hat{q}_j}{\partial x_j} \\ = -B_1 - B_2 - B_3 + B_4 + B_5 + B_6 - B_7 \quad (\text{A II-60}) \end{aligned}$$

4. Équation de conservation de la vapeur

Enfin, on filtre l'équation, ce qui donne :

$$\frac{\partial \bar{\rho}Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z \tilde{u}_j}{\partial x_j} - \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) + \bar{S} = -\frac{\partial}{\partial x_j} C_1 + C_2 \quad (\text{A II-61})$$

Avec :

$$C_1 = \bar{\rho}(\widetilde{Zu_j} - \tilde{Z}\tilde{u}_j) \quad (\text{A II-62})$$

Et

$$C_2 = \frac{1}{RePr} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\frac{\partial Z}{\partial x_j}} - \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right) \quad (\text{A II-63})$$

Puis :

$$\bar{S} = \frac{10^3 \bar{r}^3}{Z_0} \cdot \frac{1}{V_{maille}} n_{trans} \sum_{k=1}^{n_p} \dot{m}_k \quad (\text{A II-64})$$

Le filtrage du terme de couplage consiste dans un premier temps à écrire que le volume élémentaire autour du point considéré correspond au volume de la maille centrée en ce point. Le terme C_2 est similaire au terme B_7 présent dans l'équation de l'énergie filtrée et ne sera donc pas considéré pour des raisons de cohérence.

ANNEXE III

LES SCHÉMAS DE DISCRÉTISATION SPATIALE

On se propose dans ce qui suit de détailler les différentes étapes nécessaires à la construction des schémas de discrétisation spatiale.

1. Schémas de discrétisation pour les termes convectifs

Afin de simplifier les explications, les expressions des dérivées restent les mêmes quelque soit la direction considérée, la direction x est prise comme référence. À un nœud indexé i , f'_i désigne l'approximation de la dérivée première :

$$\alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} = b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad (\text{A III-1})$$

Où h désigne le pas d'espace spatial : $h = x_{i+1} - x_{i-1}$.

Les développements limités nécessaires à la construction des schémas sont les suivants :

$$f_{i-2} = f_i - 2hf_i^1 + \frac{4h^2}{2!}f_i^2 - \frac{8h^3}{3!}f_i^3 + \frac{16h^4}{4!}f_i^4 - \frac{32h^5}{5!}f_i^5 + \frac{64h^6}{6!}f_i^6 - \frac{128h^7}{7!}f_i^7 + O(h^8) \quad (\text{A III-2})$$

$$f_{i-1} = f_i - hf_i^1 + \frac{h^2}{2!}f_i^2 - \frac{h^3}{3!}f_i^3 + \frac{h^4}{4!}f_i^4 - \frac{h^5}{5!}f_i^5 + \frac{h^6}{6!}f_i^6 - \frac{h^7}{7!}f_i^7 + O(h^8) \quad (\text{A III-3})$$

$$f_{i+1} = f_i + hf_i^1 + \frac{h^2}{2!}f_i^2 + \frac{h^3}{3!}f_i^3 + \frac{h^4}{4!}f_i^4 + \frac{h^5}{5!}f_i^5 + \frac{h^6}{6!}f_i^6 + \frac{h^7}{7!}f_i^7 + O(h^8) \quad (\text{A III-4})$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf_i^1 + \frac{4h^2}{2!}f_i^2 + \frac{8h^3}{3!}f_i^3 + \frac{16h^4}{4!}f_i^4 + \frac{32h^5}{5!}f_i^5 + \frac{64h^6}{6!}f_i^6 + \frac{128h^7}{7!}f_i^7 + O(h^8) \quad (\text{A III-5})$$

Premier cas : $3 \leq i \leq m_1 - 2$:

On cherche les coefficients α , b et a tels que :

$$\alpha(f'_{i-1} + f'_{i+1}) + f'_i = b(f_{i+2} - f_{i-2}) + a(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-6})$$

Soit :

$$f'_i = \alpha'(f'_{i-1} + f'_{i+1}) + b(f_{i+2} - f_{i-2}) + a(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-7})$$

avec $\alpha' = -\alpha$

D'après les développements limités ci-dessus explicités, on a :

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i^1 + \frac{2h^3}{3!}f_i^3 + \frac{2h^5}{5!}f_i^5 + \frac{2h^7}{7!}f_i^7 + O(h^9) \quad (\text{A III-8})$$

$$f_{i+2} - f_{i-2} = 4hf_i^1 + \frac{16h^3}{3!}f_i^3 + \frac{64h^5}{5!}f_i^5 + \frac{256h^7}{7!}f_i^7 + O(h^9) \quad (\text{A III-9})$$

$$f'_{i+1} = f_i^1 + hf_i^2 + \frac{h^2}{2!}f_i^3 + \frac{h^3}{3!}f_i^4 + \frac{h^4}{4!}f_i^5 + \frac{h^5}{5!}f_i^6 + \frac{h^6}{6!}f_i^7 + \frac{h^7}{7!}f_i^8 + O(h^8) \quad (\text{A III-10})$$

$$f'_{i-1} = f_i^1 - hf_i^2 + \frac{h^2}{2!}f_i^3 - \frac{h^3}{3!}f_i^4 + \frac{h^4}{4!}f_i^5 - \frac{h^5}{5!}f_i^6 + \frac{h^6}{6!}f_i^7 - \frac{h^7}{7!}f_i^8 + O(h^8) \quad (\text{A III-11})$$

$$f'_{i+1} + f'_{i-1} = 2f'_i + h^2 f''_i + \frac{h^4}{12} f^{(4)}_i + \frac{2h^6}{6!} f^{(6)}_i + O(h^8) \quad (\text{A III-12})$$

Pour que l'équation A III-7 soit vérifiée, les coefficients α' , b et a doivent satisfaire le système suivant :

$$\begin{cases} 2\alpha' + 4hb + 2ha = 1 \\ \alpha' h^2 + \frac{16h^3}{6} b + \frac{2h^3}{6} a = 0 \\ \alpha' \frac{h^4}{12} + \frac{64h^5}{5!} b + \frac{2h^5}{5!} a = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-13})$$

Ce qui peut se réécrire :

$$\begin{cases} \alpha' + 2hb + ha = 1 \\ 6\alpha' + 16hb + 2ha = 0 \\ \alpha' + \frac{32}{5}hb + \frac{1}{5}ha = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-14})$$

La solution de ce système est :

$$\alpha' = -\frac{1}{3}, b = \frac{1}{36h}, a = \frac{7}{9h} \quad (\text{A III-15})$$

$$\alpha = \frac{1}{3}, b = \frac{1}{36h}, a = \frac{7}{9h} \quad (\text{A III-16})$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{3}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{3}f'_{i+1} = \frac{1}{36h}(f_{i+2} - f_{i-2}) + \frac{7}{9h}(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-17})$$

Ou

$$\frac{1}{3}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{3}f'_{i+1} = \frac{1}{9} \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + \frac{14}{9} \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad (\text{A III-18})$$

Si l'équation :

$$\alpha' \times \frac{2h^6}{6!} + b \times \frac{256h^7}{7!} + a \times \frac{2h^7}{7!} = 0 \quad (\text{A III-19})$$

Est vérifiée, le schéma est d'ordre 7 au moins. Or en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, on trouve :

$$\alpha' \times \frac{2h^6}{6!} + b \times \frac{256h^7}{7!} + a \times \frac{2h^7}{7!} = 4 \quad (\text{A III-20})$$

Le schéma est donc d'ordre 6, et l'erreur de troncature de :

$$(\alpha' \times \frac{2h^6}{6!} + b \times \frac{256h^7}{7!} + a \times \frac{2h^7}{7!})f_i^7 \quad (\text{A III-21})$$

Soit, en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, $\frac{4}{7!} \times h^6 \times f_i^7$.

Deuxième cas : $i = 2$ et $i = m_1 - 1$:

On procède de manière analogue, et on cherche les coefficients α , b et a tels que :

$$\alpha(f'_{i-1} + f'_{i+1}) + f'_i = a(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-22})$$

Soit :

$$f'_i = \alpha'(f'_{i-1} + f'_{i+1}) + a(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-23})$$

avec $\alpha' = -\alpha$

Pour que l'équation A III-23 soit vérifiée, les coefficients α' et a doivent satisfaire le système suivant :

$$\begin{cases} 2\alpha' + 2ha = 1 \\ \alpha'h^2 + a \times \frac{2h^3}{6} = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-24})$$

Soit :

$$\begin{cases} \alpha' + ha = 1/2 \\ \alpha' + a \times \frac{h}{3} = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-25})$$

La solution de ce système est :

$$\alpha' = -\frac{1}{4}, a = \frac{3}{4h} \quad (\text{A III-26})$$

Ou

$$\alpha = \frac{1}{3}, a = \frac{3}{4h} \quad (\text{A III-27})$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\frac{1}{3}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{3}f'_{i+1} = \frac{3}{4h}(f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (\text{A III-28})$$

Ou

$$\frac{1}{3}f'_{i-1} + f'_i + \frac{1}{3}f'_{i+1} = \frac{3}{2} \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \quad (\text{A III-29})$$

Si l'équation :

$$\alpha' \times \frac{h^4}{12} + a \times \frac{2h^5}{5!} = 0 \quad (\text{A III-30})$$

Est vérifiée, le schéma est d'ordre 5 au moins. Or en remplaçant α' et a par leurs valeurs respectives, on trouve :

$$\alpha' \times \frac{h^4}{12} + a \times \frac{2h^5}{5!} = -\frac{1}{120} \quad (\text{A III-31})$$

Le schéma est donc d'ordre 4, et l'erreur de troncature de :

$$(\alpha' \times \frac{h^4}{12} + a \times \frac{2h^5}{5!})f_i^5 \quad (\text{A III-32})$$

Soit, en remplaçant α' et a par leurs valeurs respectives, $-\frac{h^4}{5!} \times f_i^5$.

Troisième et quatrième cas : $i = 1$ et $i = m_1$:

Pour $i = 1$: On cherche les coefficients α , b et a tels que :

$$f'_i + \alpha f'_{i+1} = a(f_{i+1} - f_i) + b(f_{i+2} - f_i) \quad (\text{A III-33})$$

Soit :

$$f'_i = \alpha' f'_{i+1} + a(f_{i+1} - f_i) + b(f_{i+2} - f_i) \quad (\text{A III-34})$$

avec $\alpha' = -\alpha$

Pour que l'équation A III-34 soit vérifiée, les coefficients α' , b et a doivent satisfaire le système suivant :

$$\begin{cases} \alpha' + ah + 2hb = 1 \\ \alpha'h + \frac{h^2}{2}a + \frac{4h^2}{2}b = 0 \\ \alpha'\frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6}a + \frac{8h^3}{6}b = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-35})$$

La solution de ce système est :

$$\alpha' = -2, a = \frac{2}{h}, b = \frac{1}{2h} \quad (\text{A III-36})$$

Ou

$$\alpha = 2, a = \frac{2}{h}, b = \frac{1}{2h} \quad (\text{A III-37})$$

Si l'équation :

$$\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24} = 0 \quad (\text{A III-38})$$

Est vérifiée, le schéma est d'ordre 4 au moins. Or en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, on trouve :

$$\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24} = \frac{1}{12} \quad (\text{A III-39})$$

Le schéma est donc d'ordre 3, et l'erreur de troncature de :

$$(\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24})f_i^4 \quad (\text{A III-40})$$

Soit, en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, $\frac{h^3}{12} \times f_i^4$.

Finalement le schéma s'écrit :

$$f'_i + 2f'_{i+1} = \frac{2}{h}(f_{i+1} - f_i) + \frac{1}{2h}(f_{i+2} - f_i) \quad (\text{A III-41})$$

Ce qui peut se réécrire, pour $i = 1$:

$$f'_1 + 2f'_2 = 1/h \{2f_2 + 0,5f_3 - 2,5f_1\} \quad (\text{A III-42})$$

Pour $i = m_1$:

On cherche les coefficients α , b et a tels que :

$$f'_i + \alpha f'_{i-1} = a(f_{i-1} - f_i) + b(f_{i-2} - f_i) \quad (\text{A III-43})$$

Soit :

$$f'_i = \alpha' f'_{i-1} + a(f_{i-1} - f_i) + b(f_{i-2} - f_i) \quad (\text{A III-44})$$

avec $\alpha' = -\alpha$

Pour que l'équation A III-44 soit vérifiée, les coefficients α' , b et a doivent satisfaire le système suivant :

$$\begin{cases} \alpha' - ah - 2hb = 1 \\ \alpha'h + \frac{h^2}{2}a + \frac{4h^2}{2}b = 0 \\ -\alpha'\frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6}a - \frac{8h^3}{6}b = 0 \end{cases} \quad (\text{A III-45})$$

La solution de ce système est :

$$\alpha' = -2, a = -\frac{2}{h}, b = -\frac{1}{2h} \quad (\text{A III-46})$$

Ou

$$\alpha = 2, a = -\frac{2}{h}, b = -\frac{1}{2h} \quad (\text{A III-47})$$

Si l'équation :

$$-\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24} = 0 \quad (\text{A III-48})$$

est vérifiée, le schéma est d'ordre 4 au moins. Or en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, on trouve :

$$-\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24} = -\frac{3}{4} \quad (\text{A III-49})$$

Le schéma est donc d'ordre 3, et l'erreur de troncature de :

$$\left(-\alpha' \times \frac{h^3}{6} + a \times \frac{h^4}{24} + b \times \frac{16h^4}{24}\right) f_i^4 \quad (\text{A III-50})$$

Soit, en remplaçant α' , b et a par leurs valeurs respectives, $-\frac{3h^3}{4} \times f_i^4$. Finalement le schéma s'écrit :

$$f'_i + 2f'_{i-1} = -\frac{2}{h}(f_{i-1} - f_i) - \frac{1}{2h}(f_{i-2} - f_i) \quad (\text{A III-51})$$

Ce qui peut se réécrire, pour $i = m_1$:

$$f'_{m_1} + 2f'_{m_1-1} = 1/h \{2, 5f_{m_1} - 2f_{m_1-1} - 0, 5f_{m_1-2}\} \quad (\text{A III-52})$$

2. Schémas de discrétisation pour les termes diffusifs

Comme pour le cas précédent, et afin de simplifier les explications, la référence x est prise pour la direction, les expressions des dérivées restant les mêmes quelque soit la direction considérée.

Il est à rappeler les termes diffusifs s'écrivent de la manière suivante : $\frac{\partial}{\partial x}(f \frac{\partial g}{\partial x})$. Dans le cas d'un maillage à pas d'espace variable, cette dernière expression peut être écrite de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x}(f \frac{\partial g}{\partial x})_i = \frac{(f \frac{\partial g}{\partial x})_{i+1/2} - (f \frac{\partial g}{\partial x})_{i-1/2}}{(\Delta_i + \Delta_{i-1})/2} + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-53})$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(f \frac{\partial g}{\partial x})_i = \frac{2}{(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \left[f_{i+1/2} \frac{g_{i+1} - g_i}{\Delta_i} - f_{i-1/2} \frac{g_i - g_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right] + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-54})$$

Avec $\Delta_i = x_{i+1} - x_i$ et $\Delta_{i-1} = x_i - x_{i-1}$

Or

$$f_{i+1/2} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1}) + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-55})$$

$$f_{i-1/2} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i-1}) + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-56})$$

D'où :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial g}{\partial x} \right)_i = \frac{2}{(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \left[\frac{1}{2}(f_i + f_{i+1}) \frac{g_{i+1} - g_i}{\Delta_i} - \frac{1}{2}(f_i + f_{i-1}) \frac{g_i - g_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right] + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-57})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial g}{\partial x} \right)_i = \frac{1}{(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \left[(f_i + f_{i+1}) \frac{g_{i+1} - g_i}{\Delta_i} - (f_i + f_{i-1}) \frac{g_i - g_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right] + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-58})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial g}{\partial x} \right)_i = \frac{1}{(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \left[(f_i + f_{i+1}) \frac{g_{i+1} - g_i}{\Delta_i} - (f_i + f_{i-1}) \frac{g_i - g_{i-1}}{\Delta_{i-1}} \right] + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-59})$$

Enfin si le maillage est régulier : $\Delta_i = x_{i+1} - x_i = \Delta_{i-1} = x_i - x_{i-1}$, et on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial g}{\partial x} \right)_i = \frac{1}{(2\Delta_i^2)} [(f_i + f_{i+1})(g_{i+1} - g_i) - (f_i + f_{i-1})(g_i - g_{i-1})] + O(\Delta_i^2) \quad (\text{A III-60})$$

Soit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(f \frac{\partial g}{\partial x} \right)_i &= \frac{1}{(2\Delta_i^2)} [(f_i + f_{i+1})g_{i+1} + (f_i + f_{i+1})(-g_i) - (f_i + f_{i-1})g_i + (f_i + f_{i-1})g_{i-1}] \\ &\quad + O(\Delta_i^2) \end{aligned} \quad (\text{A III-61})$$

Ce qui peut se réécrire :

$$\frac{\partial}{\partial x} f \frac{\partial g}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta_i^2} \left\{ (f_i + f_{i+1})g_{i+1} - 2\left(f_i + \frac{f_{i-1} - f_{i+1}}{2}\right)g_i + (f_{i-1} + f_i)g_{i-1} \right\} \quad (\text{A III-62})$$

ANNEXE IV

CALCUL DES GRANDEURS TURBULENTES

Les transformées de Fourier des vecteurs vitesse sont définies, selon la direction y, par :

$$\tilde{u}_i(x, z, k_y, t) = \frac{1}{N_y} \sum_y u_i(x, y, z, t) \exp(-i\overline{k_y} \cdot \overline{y}) \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A IV-1})$$

\overline{y} désigne le vecteur d'écart spatial, tandis que $\overline{k_y}$ est le vecteur nombre d'onde. On définit k_y comme étant la norme de $\overline{k_y}$. k_y est alors le nombre d'onde longitudinal donné par :

$$k_y = \frac{2\pi n}{L_y} \text{ avec } 0 \leq n \leq N_y \quad (\text{A IV-2})$$

Ces transformées de Fourier permettent ensuite de définir le spectre pour les tensions turbulentes, r_{ij} :

$$r_{ij}(x, z, k_y, t) = \tilde{u}_i(x, z, k_y, t) \cdot \tilde{u}_j^t(x, z, k_y, t) \quad (\text{A IV-3})$$

La moyenne dans le plan (x, z), notée $\overline{R_{ij}}$, est alors obtenue à l'aide d'une somme sur les nombres d'onde longitudinaux, de sorte que :

$$\overline{R_{ij}}(x, z, t) = \sum_{k_y=0}^{k_y=\frac{2\pi N_y}{L_z}} r_{ij}(x, z, k_y, t) \quad (\text{A IV-4})$$

ANNEXE V

LIMITEUR MSOU SUPERBEE (MONOTONIC SECOND ORDER UPWIND)

Le traitement numérique de la convection d'un scalaire est délicat dans la mesure où ce dernier doit resté borné entre 0 et 1. Sous la présence de forts gradients, l'utilisation d'un schéma d'ordre élevé, comme c'est le cas pour le schéma compact, peut alors conduire à l'apparition d'un comportement oscillatoire non-physique. Il est possible de remédier aux problèmes de résolution des fronts raides en faisant appel à un limiteur de flux. Dans ce contexte, Brunet (1999) a alors procédé à une étude comparative et montré que le limiteur MSOU Superbee (Monotonic Second Order Upwind) offrait le comportement le plus adéquat pour la convection d'un profil Gaussien de scalaire passif dans un champ de vitesse tourbillonnaire. C'est pourquoi ce limiteur est ici employé pour la résolution des termes convectifs associés au champ de scalaire passif. Une description très succincte du principe de ce limiteur est décrite ci dessous.

Afin de simplifier les explications, un cas unidimensionnel est considéré. Le terme convectif prend alors la forme suivante :

$$\frac{\partial \rho Z u}{\partial x} \quad (\text{A V-1})$$

En utilisant la méthode des volumes finis, l'expression A V-1 peut être approchée par :

$$\{(\rho Z u)_{i+1/2} - (\rho Z u)_{i-1/2}\} / \Delta x = (F_{i+1/2} - F_{i-1/2}) / \Delta x \quad (\text{A V-2})$$

Un schéma du second ordre classique (SOU, Second Order Upwind) aurait évalué les flux F comme :

$$F_{i+1/2} = \frac{(u_{i+1/2} + |u_{i+1/2}|)}{2} \left\{ \frac{3}{2}(\rho Z)_i - \frac{1}{2}(\rho Z)_{i-1} \right\} + \frac{(u_{i+1/2} - |u_{i+1/2}|)}{2} \left\{ \frac{3}{2}(\rho Z)_{i+1} - \frac{1}{2}(\rho Z)_{i+2} \right\} \quad (\text{A V-3})$$

Avec le limiteur MSOU Superbee, on obtient :

$$F_{i+1/2} = \frac{(u_{i+1/2}^+ |u_{i+1/2}|)}{2} \{(\rho Z)_i - \frac{1}{2} \Psi_i^- ((\rho Z)_i - (\rho Z)_{i-1})\} \\ + \frac{(u_{i+1/2}^- |u_{i+1/2}|)}{2} \{(\rho Z)_{i+1} - \frac{1}{2} \Psi_i^+ ((\rho Z)_{i+2} - (\rho Z)_{i+1})\} \quad (\text{A V-4})$$

Avec

$$\Psi_i^\pm = \max \{0, \min(2r_i^\pm, 1), \min(r_i^\pm, 2)\} \quad (\text{A V-5})$$

Et

$$r_i^- = \frac{(\rho Z)_{i+1} - (\rho Z)_i}{(\rho Z)_i - (\rho Z)_{i-1}}, r_i^+ = \frac{(\rho Z)_i - (\rho Z)_{i-1}}{(\rho Z)_{i+1} - (\rho Z)_{i+2}} \quad (\text{A V-6})$$

$u_{i+1/2}$ est évalué comme :

$$u_{i+1/2} = 1/12 \{-u_{i+2} + 7(u_{i+1} + u_i) - u_{i-1}\} \quad (\text{A V-7})$$

ANNEXE VI

PARALLÉLISATION DU CODE FLUDILES AVEC MPI

1. Brève introduction à MPI

Les éléments importants du standard MPI utilisés dans le code FLUDILES sont présentés ci-dessous. Il est à remarquer que toutes les informations sont tirées de la documentation officielle de MPI (Forum (1994)). MPI est basé sur le transfert d'informations et de données entre processus. Ces données sont généralement envoyées sous la forme de vecteur. Dans FLUDILES, un message est échangé par l'appel de deux fonctions : la fonction envoyer (*send*) et la fonction recevoir (*receive*). Ces deux fonctions s'écrivent de la manière suivante :

Extrait de code VI.1 Fonctions utilisées dans MPI

```
MPI_SEND( buf , count , datatype , dest , tag , comm )  
MPI_RECV( buf , count , datatype , source , tag , comm, status )
```

Ce type de transfert de message est appelé communication point-To-point. Mais selon le nombre de tâches demandées entre les processus, la communication point-To-point peut devenir non viable et devenir difficile à programmer. De ce fait, le standard MPI met en avant un moyen pour qu'un groupe de processus puisse communiquer et transmettre plusieurs messages. Ce type de transferts est couramment appelé communications collectives. Les communications collectives les plus communes sont présentées sur la figure VI-1. La colonne de gauche correspond à l'état de la mémoire à l'envoi tandis que la colonne de droite représente l'état de la mémoire à la réception.

Les fonctions utilisées par la communication collective sont définies comme *MPI_Bcast*, *MPI_Scatter*, *MPI_Gather*, *MPI_Allgather* et *MPI_AlltoAll* (complete exchange). Ces fonctions sont optimisées pour minimiser le nombre de messages utilisés pour accomplir une tâche. Ces communications sont donc le parfait mélange de performance et de simplicité.

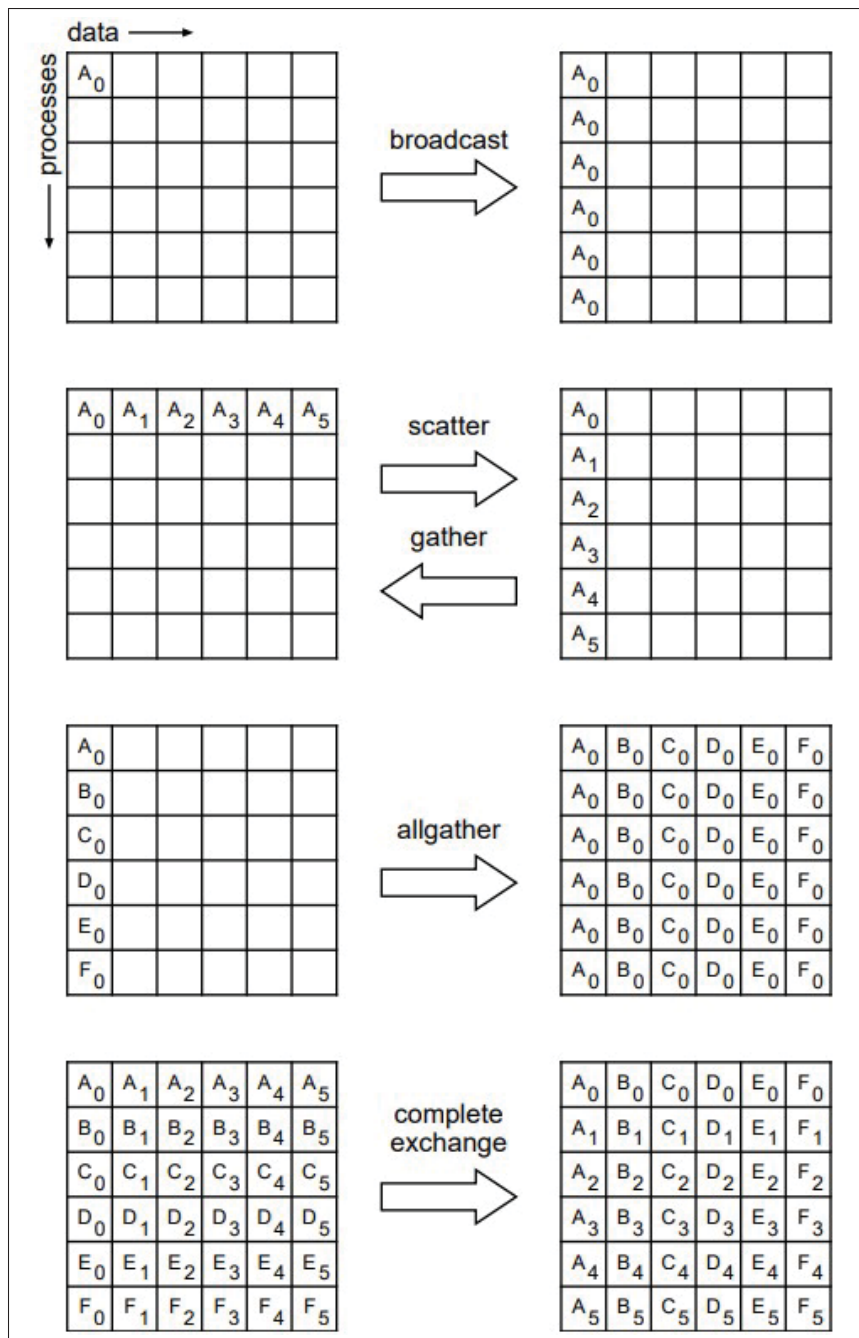


Figure-A VI-1 Opérations collectives dans MPI tiré de Forum (1994)

2. Stratégie de parallélisation du code FLUDILES avec MPI

Le paragraphe 1 a introduit l'architectures à mémoire distribuée et les outils de parallélisation adaptés pour le code FLUDILES. L'étape de parallélisation consiste à implémenter la bibliothèque

MPI dans le code FLUDILES. Pour cela, la stratégie de parallélisation par la bibliothèque MPI consiste à décomposer le domaine de calcul du problème en plusieurs sous-domaines. Un processus (ou un ensemble de processus) est attribué à chaque sous-domaine formé et résout le problème sur sa propre partie. Les calculs sont ainsi effectués en parallèle, sous réserve d'une communication régulière des données aux interfaces (dans notre cas, à chaque pas de temps). Il est préférable de faire la décomposition selon l'axe principal de calcul (axe y dans le cadre de l'étude). Après décomposition, les résultats sont envoyés entre chaque processeur grâce à des balises.

Les étapes de la stratégie de parallélisation du code FLUDILES en utilisant l'architecture MPI se résument aux étapes suivantes pour la partie fluide :

- Décomposer le domaine selon l'axe de l'écoulement y.
- Utiliser `MPI_Sendrecv` aux conditions limites pour les équations de différences finies.
- Utiliser `MPI_Reduce` / `MPI_Allreduce` lors du calcul des mesures globales.
- Limiter l'utilisation de `MPI_Scatter`/`MPI_Gather` pour les entrées/sorties (I/O).
- Un solveur tridiagonale est utilisé sur l'ensemble du domaine dans l'axe de l'écoulement y pour l'évaluation des dérivées sur y. Dans ce cas, il est préférable d'utiliser `MPI_Alltoall` pour paralléliser temporairement dans la direction z (ou x).

Pour la partie particules du code FLUDILES, les étapes de parallélisation consistent à répartir les particules entre les processus, en fonction de leur coordonnée y actuelle. Mais cette étape de répartition des particules entraîne un problème majeur ; le nombre de particules varie entre les processus. Cela est dû au fait que les particules peuvent se déplacer entre les processus. Pour pallier à ce problème, on utilise `MPI_Get_count(status, MPI_DOUBLE_PRECISION, count)` pour obtenir le décompte réel de particule dans chaque processus. Puis `MPI_Sendrecv` est utilisé pour envoyer les informations des particules à chaque processus.

Finalement, dans l'optique de faire une version parallèle de FLUDILES, il est important de savoir comment se comporte la version OpenMP et MPI. En effet, plusieurs stratégies sont possibles

lorsqu'il s'agit d'utiliser les ressources de calcul avec une version distribuée, et au sein d'un nœud de calcul, il est possible de mettre un ou plusieurs processus utilisant la mémoire partagée. Il est donc important de savoir comment se comportent l'implémentation OpenMP en mémoire partagée et MPI en mémoire distribuée. Dans un premier temps, l'étude de l'accélération et de l'efficacité est faite. Puis, les résultats obtenus par la version OpenMP et MPI sont comparés avec la version séquentielle, qui elle a été déjà validée (voir Gago (2002), Maglaras (2007)).

2.1 Accélération et efficacité

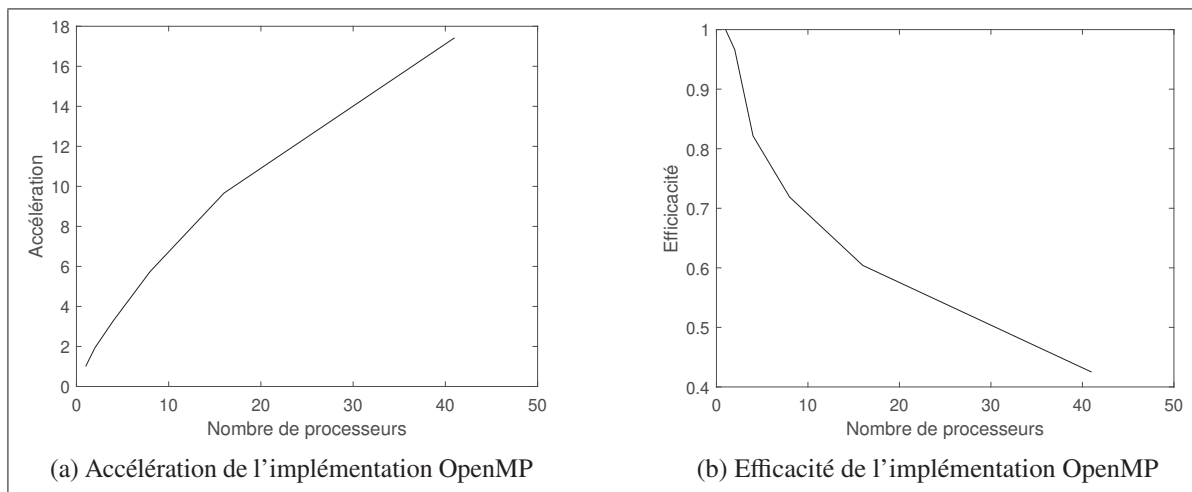


Figure-A VI-2 Accélération et efficacité de l'implémentation MPI

La figure VI-2a montre comment se comporte le code FLUDILES avec MPI en faisant varier le nombre de CPUs entre 1 et 48. Le point positif est l'augmentation permanente de l'accélération avec le nombre de CPUs pour les cas considérés. Par contre, l'efficacité (figure VI-2b) diminue considérablement en augmentant le nombre de processeur. Cette performance est due principalement au trop grand nombre de communications entre les processeurs ainsi qu'à un déséquilibre de charge entre processeurs (charge de calcul et temps d'attente). Cela implique que des processeurs marchent à 100 % tandis que d'autres n'ont aucune charge de travail. Cependant, il est clair que dans certains cas, d'autres paramètres, hors de notre cadre de travail, influencent grandement l'efficacité du code FLUDILES.

2.2 Comparaison entre les résultats MPI avec la version séquentielle

La validation de la parallélisation par MPI passe par la comparaison des résultats obtenus par la parallélisation avec ceux de la littérature. Pour cela, les études de Maglaras (2007) ainsi que ceux de Gago (2002) ont été choisis. Il s'agit ici d'une étude temporelle des premiers instants de vie de la formation de traînées de condensation. Pour cela, une simulation de jet chaud turbulent en sortie de moteur, utilisant des données relatives d'un moteur CFM56 en altitude de croisière, avec la formation de particule de glace est faite. Les résultats obtenus sont comparés sur la partie fluide et sur la partie croissance des particules. Il s'agit ici de faire une comparaison simple des résultats obtenus.

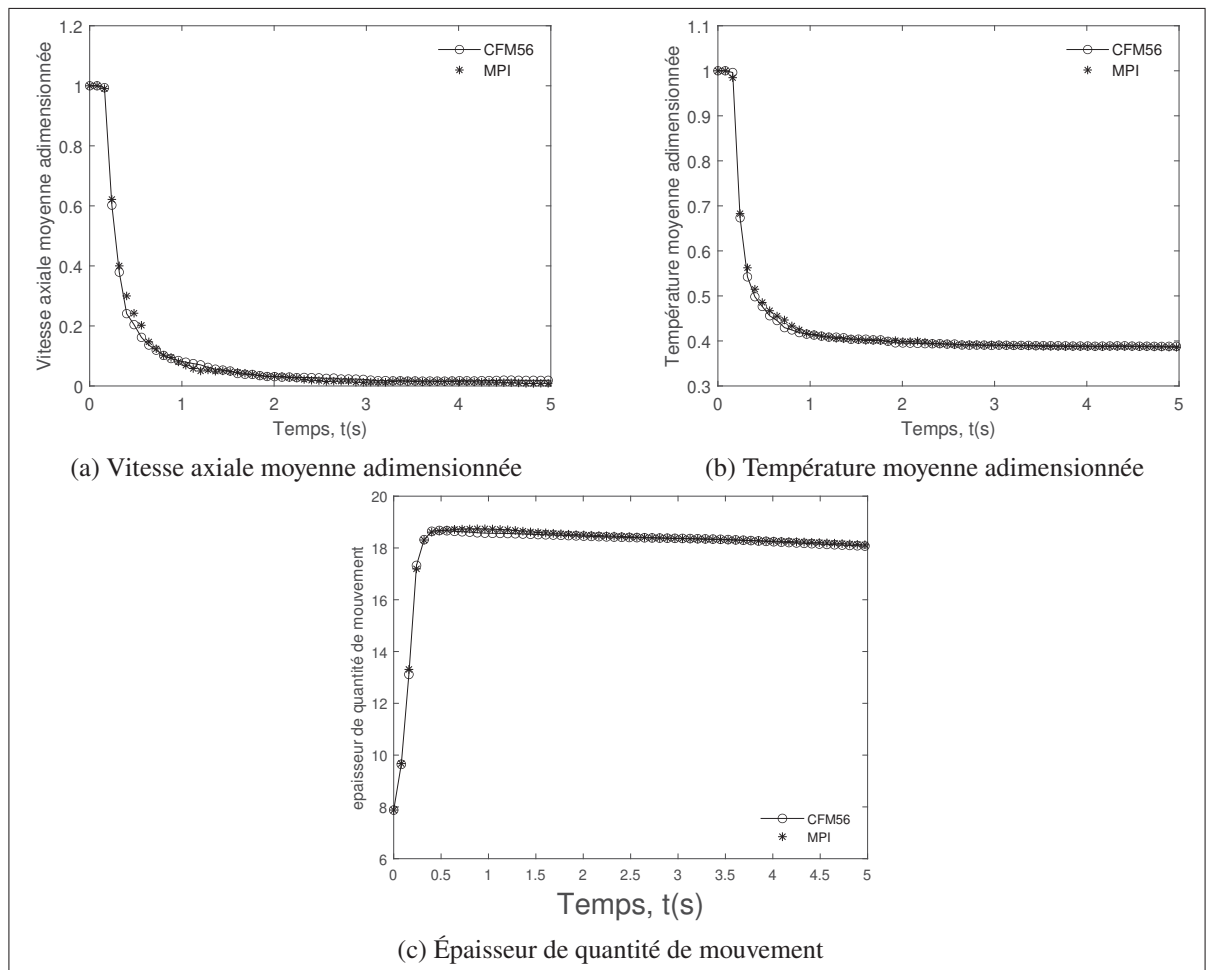


Figure-A VI-3 Validation de la phase gazeuse

Par contre, les résultats obtenus par la parallélisation MPI montrent un écart faible, mais cependant présent (moins de 2 %) par rapport aux résultats de la littérature que ce soit pour le nombre de particules saturé (figure VI-4a), de la saturation moyenne (figure VI-4b) et du rayon moyen (figure VI-4c). Cette différence est visible lors de la période de transition et la différence n'existe plus vers la fin de la simulation. Cet écart est dû au fait que les particules se déplacent dans le domaine de calcul et lors du calcul parallèle, sont transportées entre processeurs et peut causer une perte d'information sur les données des particules. Cela peut induire à des pertes d'informations entre processeurs.

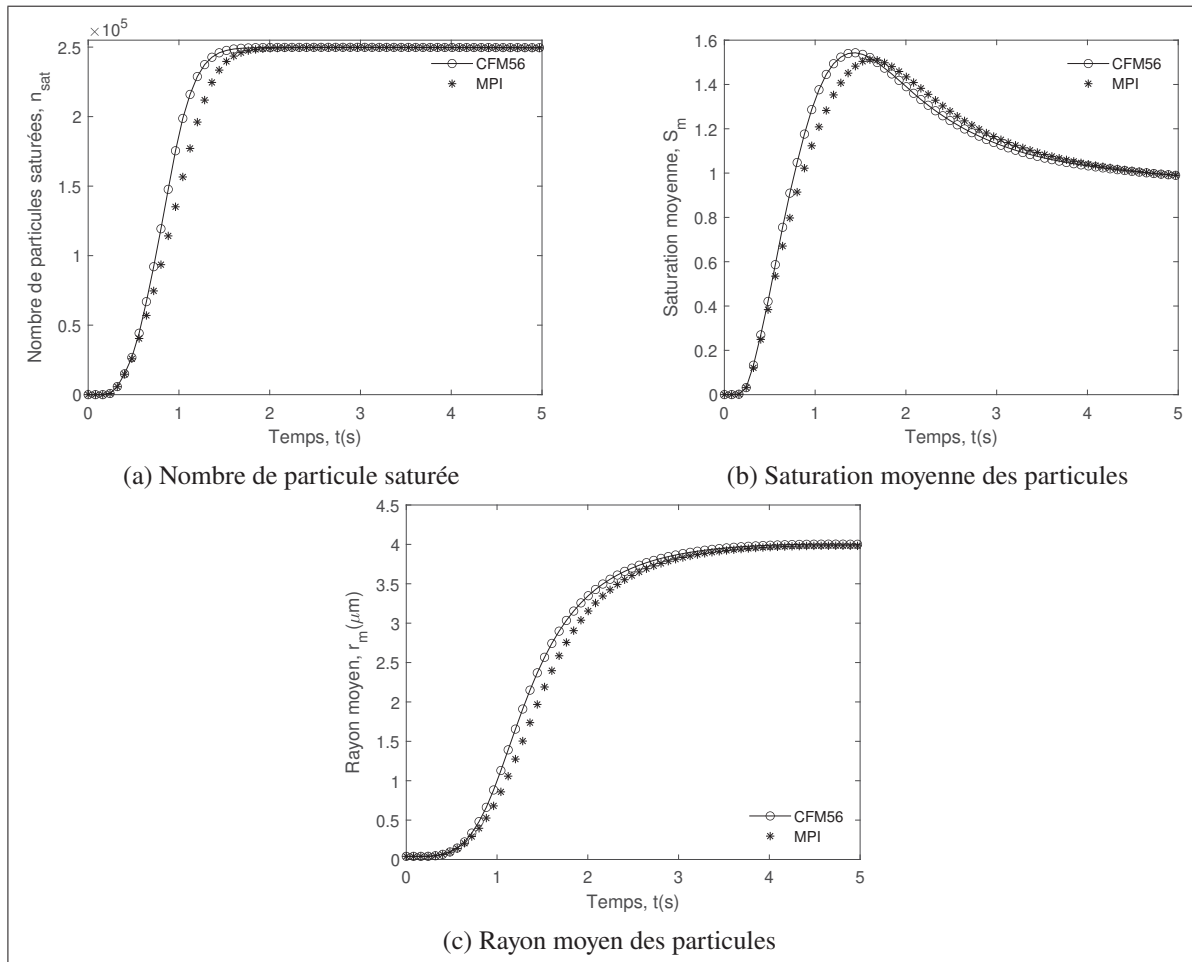


Figure-A VI-4 Validation de la phase dispersée

La parallélisation par MPI donne une bonne accélération et une meilleure efficacité. Les résultats obtenus après parallélisation sont en accord avec la littérature pour la partie fluide du code FLUDILES, mais, par contre, ne sont pas en accord avec la littérature pour les résultats sur la formation des particules de glaces. Ainsi, le code parallélisé par la méthode MPI n'est pas utilisé pour la suite de l'étude.

RÉFÉRENCES

- Abramovich, G. (1963). The theory of turbulent jets, Massachussets Institute of Technology. Cambridge, MIT Press.
- Advisory, A. & No, R. (1998). A selection of test cases for the validation of large-eddy simulations of turbulent flows. *AGARD Advisory Report*, (345).
- Almeida, T. G. & Jaber, F. a. (2008). Large-eddy simulation of a dispersed particle-laden turbulent round jet. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(3-4), 683–695. doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.04.023.
- Amielh, M. et al. (1996). Velocity near-field of variable density turbulent jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(10), 2149 - 2164. doi : [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(95\)00294-4](https://doi.org/10.1016/0017-9310(95)00294-4).
- Amritkar, A. et al. (2014). Efficient parallel CFD-DEM simulations using OpenMP. *Journal of Computational Physics*, 256, 501–519.
- Anderson, B. E. (2015). Alternative-Fuel Effects on Contrails Cruise EmiSSions (ACCESS-2) Flight Experiment.
- Appleman, H. (1953). The formation of exhaust condensation trails by jet aircraft. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 34(1), 14–20.
- Babu, P. C. & Mahesh, K. (2004). Upstream entrainment in numerical simulations of spatially evolving round jets. *Physics of Fluids*, 16(10), 3699–3705. doi : 10.1063/1.1780548.
- Ball, C., Fellouah, H. & Pollard, A. (2012). The flow field in turbulent round free jets. *Progress in Aerospace Sciences*, 50, 1–26.
- Bing, W. et al. (2010). Large-eddy Simulation of Near-field Dynamics in a Particle-laden Round Turbulent Jet. *Chinese Journal of Aeronautics*, 23(2), 162–169. doi : 10.1016/S1000-9361(09)60200-4.
- Boersma, B. J. et al. (1998). A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet. *Physics of fluids*, 10(4), 899–909.
- Bogey, C. et al. (2003). Noise investigation of a high subsonic, moderate Reynolds number jet using a compressible Large Eddy Simulation. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 16(4), 273–297. doi : 10.1007/s00162-002-0079-4.

- Bogey, C. & Bailly, C. (2002). Three-dimensional non-reflective boundary conditions for acoustic simulations : far field formulation and validation test cases. *Acta Acustica united with Acustica*, 88(4), 463–471.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2005). Effects of Inflow Conditions and Forcing on Subsonic Jet Flows and Noise. *AIAA journal*, 43(5), 1000–1007.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2006a). Computation of a high Reynolds number jet and its radiated noise using large eddy simulation based on explicit filtering. *Computers & Fluids*, 35(10), 1344–1358. doi : 10.1016/j.compfluid.2005.04.008.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2006b). Large eddy simulations of transitional round jets : Influence of the Reynolds number on flow development and energy dissipation. *Physics of Fluids*, 18(6), 1–14. doi : 10.1063/1.2204060.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2006c). Computation of a high Reynolds number jet and its radiated noise using large eddy simulation based on explicit filtering. *Computers & fluids*, 35(10), 1344–1358.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2006d). Large eddy simulations of round free jets using explicit filtering with/without dynamic Smagorinsky model. *International journal of heat and fluid flow*, 27(4), 603–610.
- Bogey, C. & Bailly, C. (2009). Large-eddy simulations of round jets : effects of initial conditions on self-similarity region Abstract :. *Simulation*, 1–6.
- Boucher, O. & Haywood, J. (2001). On summing the components of radiative forcing of climate change. *Climate Dynamics*, 18(3-4), 297–302.
- Brancher, P. (1996). *Etude numérique des instabilités secondaires de jets*. (Thèse de doctorat).
- Brunet, S. (1999). *Etude numérique et expérimentale du mélange des jets de moteurs dans les tourbillons de sillage d'un avion de ligne*. (Thèse de doctorat, Aix-Marseille 1).
- Burattini, P. et al. (2010). PIV and hot wire measurements in the far field of turbulent round jets. *Measurement Science and Technology*, 21(12), 125402. doi : 10.1088/0957-0233/21/12/125402.
- Candel, S. & Barrère, M. (1990). *Mécanique des fluides*. Dunod.
- Corrsin, S. & Kistler, A. L. (1955). Free-stream boundaries of turbulent flows.

- CROW, S. C. (1970). Stability theory for a pair of trailing vortices. *AIAA Journal*, 8(12), 2172-2179. doi : 10.2514/3.6083.
- Cumpsty, N. & Heyes, A. (2015). *Jet propulsion*. Cambridge University Press.
- Davidson, M. J. & Wang, H. J. (2002). Strongly Advected Jet in a Coflow. *Journal of Hydraulic Engineering*, 128(8), 742–752. doi : 10.1061/(ASCE)0733-9429(2002)128:8(742).
- Delmas, R., Mégie, G. & Peuch, V.-H. (2005). *Physique et chimie de l'atmosphère*. Belin.
- Detwiler, A. G. & Jackson, A. (2002). Contrail formation and propulsion efficiency. *Journal of aircraft*, 39(4), 638–644.
- Elghobashi, S. (1994). On predicting particle-laden turbulent flows. *Applied Scientific Research*, 52(4), 309–329. doi : 10.1007/BF00936835.
- Ellis, J. et al. (1999). Aviation and the Global Atmosphere. *Intergovernmental Panel for Climate Change* (available at : <http://www.grida.no/climate/ipcc/aviation/index.htm>).
- Erlebacher, G. et al. (1992). Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. *Journal of fluid mechanics*, 238, 155–185.
- Farokhi, S. (2014). *Aircraft propulsion*. John Wiley & Sons.
- Ferreira Gago, C. F., Brunet, S. & Garnier, F. (2002). Numerical investigation of turbulent mixing in a jet/wake vortex interaction. *AIAA Journal*, 40(2), 276–284. doi : 10.2514/3.15059.
- Fiabane, L. (2013). Méthodes analytiques de caractérisation des structures cohérentes contribuant aux efforts aérodynamiques.
- Forum, M. P. (1994). MPI : A message-passing interface standard. University of Tennessee.
- Foysi, H. et al. (2010). Large-eddy simulation of variable-density round and plane jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 31(3), 307–314. doi : 10.1016/j.ijheatfluidflow.2009.12.001.
- Fukuta, N. & Walter, L. a. (1970). *Kinetics of Hydrometeor Growth from a Vapor-Spherical Model*. *Journal of the Atmospheric Sciences*. doi : 10.1175/1520-0469(1970)027<1160:KOHGFA>2.0.CO;2.
- Gago, C. F., Garnier, F. & Utheza, F. (2003). Direct testing of subgrid scale models in large-eddy simulation of a non-isothermal turbulent jet. *International journal for numerical methods in fluids*, 42(9), 999–1026.

- Gago, C. F. (2002). *Simulations numériques d'un jet rond turbulent et de son interaction avec un tourbillon de sillage*. (Thèse de doctorat, PhD thesis, Université de Marne La Vallée).
- Garnier, E., Adams, N. & Sagaut, P. (2009). *Large eddy simulation for compressible flows*. Springer.
- Garnier, F., et al. (1999). Numerical/experimental simulation of exhaust jet mixing in wake vortex. Dans *30th Fluid Dynamics Conference*. doi : 10.2514/6.1999-3418.
- Garnier, F. et al. (1997a). Modelling exhaust plume mixing in the near field of an aircraft. *Annales Geophysicae*, 15(11), 1468–1477. doi : 10.1007/s00585-997-1468-1.
- Garnier, F. et al. (1997b). Engine emission alteration in the near field of an aircraft. *Atmospheric Environment*, 31(12), 1767–1781.
- Garnier, F. et al. (2014). Effect of Compressibility on Contrail Ice Particle Growth in an Engine Jet. *International Journal of Turbo & Jet-Engines*, 31(2), 131–140. doi : 10.1515/tjj-2013-0039.
- Gautier, R. et al. (2014). A DNS study of jet control with microjets using an immersed boundary method. 00(00), 1–21. doi : 10.1080/10618562.2014.950046.
- Gayet, J.-F. et al. (2012). The evolution of microphysical and optical properties of an A380 contrail in the vortex phase. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12(14), 6629–6643.
- Germano, M. et al. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 3(7), 1760–1765.
- Gerz, T. & Ehret, T. (1997). Wingtip vortices and exhaust jets during the jet regime of aircraft wakes. *Aerospace Science and Technology*, 1(7), 463 - 474. doi : [https://doi.org/10.1016/S1270-9638\(97\)90008-0](https://doi.org/10.1016/S1270-9638(97)90008-0).
- Gerz, T. et al. (1998). Transport and effective diffusion of aircraft emissions. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 103(D20), 25905-25913. doi : 10.1029/98JD02282.
- Gierens, K. & Jensen, E. (1998). A numerical study of the contrail-to-cirrus transition. *Geophysical Research Letters*, 25(23), 4341-4344. doi : 10.1029/1998GL900151.
- Givoli, D. (1991). Non-reflecting boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 94(1), 1–29.
- Goertler, H. (1942). Berechnung von Aufgaben der freien Turbulenz auf Grund eines neuen Näherungsansatzes. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift*

- für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 22(5), 244–254.
- Goodman, J. et al. (1998). Shape and size of contrails ice particles. *Geophysical research letters*, 25(9), 1327–1330.
- Graham, S. L. et al. (1982). Gprof : A call graph execution profiler. *ACM Sigplan Notices*, 17(6), 120–126.
- Guignery, F. (2010a). *Mécanismes microphysiques intervenant dans le sillage proche d'un avion en maillage non structuré*. (Thèse de doctorat). Repéré à Thèse de doctorat dirigée par Thual, Olivier et MONTREUIL, Emmanuel Aéronautique et Astronautique Toulouse, INPT 2010.
- Guignery, F. (2010b). *Mécanismes microphysiques intervenant dans le sillage proche d'un avion en maillage non structuré*. Repéré à <https://oatao.univ-toulouse.fr/7222/>.
- H. Fujimoto, M. Isomura, K. A. (1994). NII-Electronic Library Service. *Bioscienci Biotechnology Biochemistry*. doi : 10.1248/cpb.37.3229.
- Hansen, J. & Sato. (2007). Climate simulations for 1880-2003 with GISS modelE. *Clim. Dyn.*, 29, 661–696. doi : 10.1007/s00382-007-0255-8.
- Hansen, J. a. (2007). Dangerous human-made interference with climate : a GISS modelE study. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 7(9), 2287–2312. doi : 10.5194/acp-7-2287-2007.
- Haywood, J. M. & Shine, K. P. (1995). The effect of anthropogenic sulfate and soot aerosol on the clear sky planetary radiation budget. *Geophysical Research Letters*, 22(5), 603. doi : 10.1029/95GL00075.
- Heimsund, B. r. O. & Espedal, M. S. (2005). A parallel Eulerian-Lagrangian localized adjoint method. *Advances in Water Resources*, 28(9), 950–955. doi : 10.1016/j.advwatres.2005.02.008.
- Heymsfield, A., Baumgardner, D., DeMott, P., Forster, P., Gierens, K. & Kärcher, B. (2010). Contrail microphysics. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 91(4), 465–472.
- Heymsfield, A. J. & Westbrook, C. (2010). Advances in the estimation of ice particle fall speeds using laboratory and field measurements. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 67(8), 2469–2482.
- Hoeflinger, J. et al. (2001). Producing scalable performance with OpenMP : Experiments with two CFD applications. *Parallel Computing*, 27(4), 391–413.

- Hoshizaki, H. (1972). *Study of High-altitude Aircraft Wake Dynamics [by] H. Hoshizaki [and Others]*. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=T5GgzQEACAAJ>.
- Hulst, H. C. & van de Hulst, H. C. (1957). *Light scattering by small particles*. Courier Corporation.
- Hussaini, M. (1998). On large-eddy simulation of compressible flows. *29th AIAA, Fluid Dynamics Conference*, pp. 2802.
- Hussein, H. J. et al. (1994). Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 258, 31–75.
- Izydorczyk, J. (2007). Moore law and bounds of technology. *Przegląd Telekomunikacyjny + Wiadomości Telekomunikacyjne*, 80(2-3), 43 - 8. Moore law ;information theory ;thermodynamics ;integrated circuit ;semiconductor industry ;cooling technology ;energy saving ;CMOS technology ;.
- Jaramillo, J. E. et al. (2012). DNS and RANS modelling of a turbulent plane impinging jet. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(4), 789–801. doi : 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.10.031.
- Jarrin, N. et al. (2006). A synthetic-eddy-method for generating inflow conditions for large-eddy simulations. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 27(4), 585–593.
- Jeong, J. & Hussain, F. (1995). On the identification of a vortex. *Journal of Fluid Mechanics*, 285, 69–94. doi : 10.1017/S0022112095000462.
- Kalaushina, E. et al. (2019). Large Eddy Simulation of Turbulent Circular Jet Using OpenFOAM. *2019 Ivannikov Ispras Open Conference (ISPRAS)*, pp. 97-102.
- Kärcher, B. (1994). Transport of exhaust products in the near trail of a jet engine under atmospheric conditions. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 99(D7), 14509–14517.
- Kärcher, B. (1995). A trajectory box model for aircraft exhaust plumes. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres (1984–2012)*, 100(D9), 18835–18844.
- Kärcher, B. & Yu, F. (2009). Role of aircraft soot emissions in contrail formation. *Geophysical Research Letters*, 36(1).
- Kärcher, B. et al. (1996). *The Initial Composition of Jet Condensation Trails*. *Journal of the Atmospheric Sciences*. doi : 10.1175/1520-0469(1996)053<3066:TICOJC>2.0.CO;2.

- Kärcher, B. et al. (1996). The initial composition of jet condensation trails. *Journal of atmospheric sciences*, 53(21), 3066–3083.
- Kärcher, B. et al. (1998a). Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes : Analysis of growth mechanisms. *Geophysical Research Letters*, 25(15), 2793–2796.
- Kärcher, B. et al. (1998b). Physicochemistry of aircraft-generated liquid aerosols, soot, and ice particles : 2. Comparison with observations and sensitivity studies. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 103(D14), 17129–17147.
- Karcher, B. et al. (2018). Contrail formation : Analysis of sublimation mechanisms. *Geophysical Research Letters*, 45(24), 13–547.
- Khou, J.-C. (2016). *Modélisation des traînées de condensation par interaction entre l'aérodynamique, la cinétique chimique et la microphysique*. (Thèse de doctorat). Repéré à Thèse de doctorat dirigée par Garnier, François Physique Paris 6 2016.
- Kolomenskiy, D. & Paoli, R. (2018). Numerical simulation of the wake of an airliner. *Journal of Aircraft*, 55(4), 1689–1699.
- Kolomenskiy, D., Paoli, R. & Boussuge, J.-F. (2014). Hybrid RANS–LES Simulation of Wingtip Vortex Dynamics. *Fluids Engineering Division Summer Meeting*, 46247, V01DT33A002.
- Kärcher, B. et al. (1996). The Initial Composition of Jet Condensation Trails. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 53(21), 3066–3083. doi : 10.1175/1520-0469(1996)053<3066:TICOJC>2.0.CO;2.
- Labbé, O. et al. (2007). Large-eddy simulation of a turbulent jet and wake vortex interaction. *Computers & Fluids*, 36(4), 772–785. doi : 10.1016/j.compfluid.2006.06.001.
- Leahy, J. (2012). Global market forecast 2012-2031. Airbus.
- Lee, D. S. et al. (2010). Transport impacts on atmosphere and climate : Aviation. *Atmospheric environment*, 44(37), 4678–4734.
- Lee, D. et al. (2021). The contribution of global aviation to anthropogenic climate forcing for 2000 to 2018. *Atmospheric Environment*, 244, 117834. doi : <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2020.117834>.
- Lewellen, D. C. & Lewellen, W. S. (2001). The Effects of Aircraft Wake Dynamics on Contrail Development. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 58(4), 390–406. doi : 10.1175/1520-0469(2001)058<0390:TEOAWD>2.0.CO;2.

- Li, D. et al. (2011a). Direct numerical simulation of a particle-laden low Reynolds number turbulent round jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(6), 539 - 554. doi : <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.03.013>.
- Li, D. et al. (2011b). Direct numerical simulation of a particle-laden low Reynolds number turbulent round jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 37(6), 539–554. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.03.013.
- Li, D. et al. (2011c). Direct numerical simulation of a particle-laden low Reynolds number turbulent round jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 37, 539–554. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2011.03.013.
- Lilly, D. K. (1992). A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics (1989-1993)*, 4(3), 633–635.
- Lobo, P. et al. (2007). Physical characterization of aerosol emissions from a commercial gas turbine engine. *Journal of Propulsion and Power*, 23(5), 919–929. doi : 10.2514/1.26772.
- Lodato, G. et al. (2009). A compressible wall-adapting similarity mixed model for large-eddy simulation of the impinging round jet. *Physics of Fluids*, 21(3), 035102. doi : 10.1063/1.3068761.
- Lunet, T. (2018). *Stratégies de parallélisation espace-temps pour la simulation numérique des écoulements turbulents*. (Thèse de doctorat, Toulouse, ISAE).
- Maglaras, E. (2007). *Application de la simulation numérique des grandes échelles à la formation des traînées de condensation dans le sillage d'un avion*. (Thèse de doctorat, Bordeaux 1).
- Mattingly, G. & Chang, C. (1974). Unstable waves on an axisymmetric jet column. *Journal of Fluid Mechanics*, 65(3), 541–560.
- McIlwain, S. & Pollard, a. (2002). Large eddy simulation of the effects of mild swirl on the near field of a round free jet. *Physics of Fluids*, 14(2), 653–661. doi : 10.1063/1.1430734.
- Menon, S. & Wu, J. (1998). Effects of micro- and macroscale turbulent mixing on the chemical processes in engine exhaust plumes. *Journal of Applied Meteorology*, 37(6), 639–654.
- Miake-Lye, R. C. et al. (1993). Plume and wake dynamics, mixing, and chemistry behind a high speed civil transport aircraft. *Journal of Aircraft*, 30(4), 467-479. doi : 10.2514/3.46368.
- Michalke, A. & Hermann, G. (1982). On the inviscid instability of a circular jet with external flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 114, 343–359.

- Minnis, P. & Smith Jr, W. L. (1998). Cloud and radiative fields derived from GOES-8 during SUCCESS and the ARM-UAV spring 1996 flight series. *Geophysical research letters*, 25(8), 1113–1116.
- Minnis, P. et al. (1998). Transformation of contrails into cirrus during SUCCESS. *Geophysical Research Letters*, 25(8), 1157-1160. doi : 10.1029/97GL03314.
- Mollick, E. (2006). Establishing Moore's Law. *Annals of the History of Computing, IEEE*, 28(3), 62-75. doi : 10.1109/MAHC.2006.45.
- Oberkampf, W. L. & Trucano, T. G. (2002). Verification and validation in computational fluid dynamics. *Progress in Aerospace Sciences*, 38(3), 209 - 272. doi : [https://doi.org/10.1016/S0376-0421\(02\)00005-2](https://doi.org/10.1016/S0376-0421(02)00005-2).
- Pai, S.-I. (1954). Fluid dynamics of jets.
- Paoli, R. et al. (2013a). Effects of jet/vortex interaction on contrail formation in supersaturated conditions. *Physics of Fluids*, 25(5), 053305.
- Paoli, R. et al. (2013b). Effects of jet/vortex interaction on contrail formation in supersaturated conditions. *Physics of Fluids*, 25(5), 053305. doi : 10.1063/1.4807063.
- Paoli, R. & Garnier, F. (2005a). Interaction of exhaust jets and aircraft wake vortices : small-scale dynamics and potential microphysical-chemical transformations. *Comptes Rendus Physique*, 6(4), 525–547.
- Paoli, R. & Garnier, F. (2005b). Interaction of exhaust jets and aircraft wake vortices : small-scale dynamics and potential microphysical-chemical transformations. *Comptes Rendus Physique*, 6(4-5), 525–547.
- Paoli, R. et al. (2004a). Contrail formation in aircraft wakes. *Journal of Fluid Mechanics*, 502, 361–373. doi : 10.1017/S0022112003007808.
- Paoli, R. et al. (2004b). Contrail formation in aircraft wakes. *Journal of Fluid Mechanics*, 502, 361–373.
- Paugam, R., Paoli, R. & Cariolle, D. (2010). Influence of vortex dynamics and atmospheric turbulence on the early evolution of a contrail. *Atmospheric Chemistry & Physics*, 10(8).
- Picot, J. (2013). *Simulation aux grandes échelles de traînées de condensation dans un milieu atmosphérique stratifié et turbulent*. (Thèse de doctorat).

- Poinsot, T. J. & Lelef, S. (1992). Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of computational physics*, 101(1), 104–129.
- Pope, S. B. (2001). Turbulent flows. IOP Publishing.
- Rebaine, a. et al. (2004). Parallelization of a finite volume CFD code. *Workshops on Mobile and Wireless Networking/High Performance Scientific, Engineering Computing/Network Design and Architecture/Optical Networks Control and Management/Ad Hoc and Sensor Networks/Compil*, C, 4–10. doi : 10.1109/ICPPW.2004.1328019.
- Reinders, J. (2005). VTune performance analyzer essentials. *Intel Press*.
- Sbrizzai, F., Verzicco, R., Pidria, M. F. & Soldati, A. (2004a). Mechanisms for selective radial dispersion of microparticles in the transitional region of a confined turbulent round jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 30(11), 1389 - 1417. doi : <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2004.07.004>.
- Sbrizzai, F. et al. (2004b). Mechanisms for selective radial dispersion of microparticles in the transitional region of a confined turbulent round jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 30(11), 1389–1417. doi : 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2004.07.004.
- Schlager, H. et al. (1997). In situ observations of air traffic emission signatures in the North Atlantic flight corridor major emission signatures a mean CN / NO • abundance was measured corresponding to an emission index (EI) of about 101 • particles per. 102.
- Schmidt, E. (1941). Die entstehung von eisnebel aus den auspuffgasen von flugmotoren. *Schriften der Deutschen Akademie der Luftfahrtforschung*, Verlag R. Oldenbourg, München, Heft 44, 5(44), 1–15.
- Schröder, F. & others. (2000). On the Transition of Contrails into Cirrus Clouds. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 57(4), 464–480.
- Schröder, F. & othersS. (2000). On the transition of contrails into cirrus clouds. *Journal of the atmospheric sciences*, 57(4), 464–480.
- Schumann, U. & Arnold. (2002). Influence of fuel sulfur on the composition of aircraft exhaust plumes : The experiments SULFUR 1-7. *Journal of Geophysical Research Atmospheres*, 107(15). doi : 10.1029/2001JD000813.
- Schumann, U. et al. (1997). Large-eddy simulation of turbulence in the free atmosphere and behind aircraft. *Fluid Dynamics Research*, 20(1), 1 - 10. doi : [https://doi.org/10.1016/S0169-5983\(96\)00044-5](https://doi.org/10.1016/S0169-5983(96)00044-5).

- Schumann, U. (1996). On conditions for contrail formation from aircraft exhausts. *Meteorologische Zeitschrift*, 4–23.
- Schumann, U. (2000a). Influence of propulsion efficiency on contrail formation. *Aerospace Science and Technology*, 4(6), 391 - 401. doi : [https://doi.org/10.1016/S1270-9638\(00\)01062-2](https://doi.org/10.1016/S1270-9638(00)01062-2).
- Schumann, U. (2000b). Influence of propulsion efficiency on contrail formation. *Aerospace science and technology*, 4(6), 391–401.
- Schumann, U. (2005). Formation, properties and climatic effects of contrails. *Comptes Rendus Physique*, 6(4), 549 - 565. doi : <https://doi.org/10.1016/j.crhy.2005.05.002>. Aircraft trailing vortices.
- Schumann, U. (2012). A contrail cirrus prediction model. *Geoscientific Model Development*, 5, 543–580.
- Schumann, U. & Heymsfield, A. J. (2017). On the Life Cycle of Individual Contrails and Contrail Cirrus. *Meteorological Monographs*, 58, 3.1-3.24. doi : 10.1175/AMSMONOGRAPHSD-16-0005.1.
- Schumann, U. et al. (2000). Experimental test of the influence of propulsion efficiency on contrail formation. *Journal of Aircraft*, 37(6), 1083–1087.
- Seinfeld, J. H. & Pandis, S. N. (2006). Atmospheric chemistry and physics : from air pollution to climate change John Wiley & Sons. Inc., New York.
- Solomon, S. (2007). IPCC (2007) : Climate change the physical science basis. *AGUFM*, 2007, U43D–01.
- Sorokin, a. et al. (2001). On volatile particle formation in aircraft exhaust plumes. *Physics and Chemistry of the Earth, Part C : Solar, Terrestrial and Planetary Science*, 26(8), 557–561. doi : 10.1016/S1464-1917(01)00047-2.
- Subramaniam, S. (2013). Lagrangian-Eulerian methods for multiphase flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 39(2-3), 215–245. doi : 10.1016/j.pecs.2012.10.003.
- Tajallipour, N. et al. (2013). Large-eddy simulation of a compressible free jet flow on unstructured elements. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 23(2), 336–354.
- Taylor, G. I. (1935). Statistical theory of turbulenc. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences*, 151(873), 421–444.

- Thompson, K. W. (1990). Time-dependent boundary conditions for hyperbolic systems, II. *Journal of Computational Physics*, 89, 439–461. doi : 10.1016/0021-9991(90)90152-Q.
- Thompson, K. W. (1987). Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 68(1), 1–24. doi : 10.1016/0021-9991(87)90041-6.
- Toon, O. B. & Miake-Lye, R. C. (1998). Subsonic aircraft : Contrail and cloud effects special study (SUCCESS). *Geophysical Research Letters*, 25(8), 1109–1112.
- Uthuppan, J. et al. (1994). Particle dispersion in a transitional axisymmetric jet - A numerical simulation. *AIAA Journal*, 32(10), 2004-2014. doi : 10.2514/3.12245.
- Vancassel, X. (2001). Simulation of aerosols in near-field aircraft plumes : application to meso-scale models initialisation. 1–12.
- Vancassel, X. et al. (2014). Numerical simulation of aerosols in an aircraft wake using a 3D LES solver and a detailed microphysical model To cite this version :.
- Vancassel, X. (2003). *Modélisation microphysique de la formation et de l'évolution d'aérosols et de leurs précurseurs dans les sillages d'avions*. (Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur (Strasbourg)).
- Versteeg, H. K. & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method*. Pearson Education.
- Verzicco, R. & Orlandi, P. (1994). Direct simulations of the transitional regime of a circular jet. *Physics of Fluids*, 6(2), 751-759. doi : 10.1063/1.868313.
- Vreman, A. W. (1995). *Direct and large-eddy simulation of the compressible turbulent mixing layer*. Universiteit Twente.
- Wang, F. Y. et al. (2000). Near-Field Interaction of a Jet with Leading-Edge Vortices. *Journal of Aircraft*, 37(5), 779-785. doi : 10.2514/2.2700.
- Wang, Z. et al. (2010). Direct numerical simulation of subsonic round turbulent jet. *Flow, Turbulence and Combustion*, 84(4), 669–686. doi : 10.1007/s10494-010-9248-5.
- Welch, P. (1967). The use of fast Fourier transform for the estimation of power spectra : A method based on time averaging over short, modified periodograms. *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics*, 15(2), 70-73. doi : 10.1109/TAU.1967.1161901.
- Wey, C. C. et al. (2007). Overview on the aircraft particle emissions experiment (APEX). *Journal of Propulsion and Power*, 23(5), 898–905.

- White, F. M. & Corfield, I. (1991). *Viscous fluid flow*. McGraw-Hill New York.
- Wong, H.-W. et al. (2008). Microphysical Modeling of Ground-Level Aircraft-Emitted Aerosol Formation : Roles of Sulfur-Containing Species. *Journal of Propulsion and Power*, 24(3), 590–602. doi : 10.2514/1.32293.
- Wong, H.-W. et al. (2014a). Detailed Microphysical Modeling of the Formation of Organic and Sulfuric Acid Coatings on Aircraft Emitted Soot Particles in the Near Field. *Aerosol Science and Technology*, 48(9), 981–995. doi : 10.1080/02786826.2014.953243.
- Wong, H.-W. et al. (2014b). Detailed Microphysical Modeling of the Formation of Organic and Sulfuric Acid Coatings on Aircraft Emitted Soot Particles in the Near Field. *Aerosol Science and Technology*, 48(9), 981–995.
- Wynanski, I. & Fiedler, H. (1969). Some measurements in the self-preserving jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 38(03), 577. doi : 10.1017/S0022112069000358.
- Yang, P. et al. (2010). Contrails and induced cirrus : Optics and radiation. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 91(4), 473–478.
- Yu, F. & Turco, R. P. (1998). The formation and evolution of aerosols in stratospheric aircraft plumes : Numerical simulations and comparisons with observations. *Journal of Geophysical Research*, 103(D20), 25915. doi : 10.1029/98JD02453.
- Yule, A. J. (1978). Large-scale structure in the mixing layer of a round jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 89(3), 413–432. doi : 10.1017/S0022112078002670.
- Zemtsop, C. & Stoellinger, M. (2009). Large eddy simulation of swirling turbulent jet flows. *AIAA Journal*. Repéré à http://zanran_storage.s3.amazonaws.com/www.uwyo.edu/ContentPages/50272430.pdf.
- Zhang, H., Rong, Y., Wang, B. & Wang, X. (2011). Large eddy simulation of a 3-D spatially developing turbulent round jet. *Science China Technological Sciences*, 54(11), 2916–2923. doi : 10.1007/s11431-011-4577-8.
- Zhang, X. & Stanescu, D. (2010). Large eddy simulations of round jet with spectral element method. *Computers & Fluids*, 39(2), 251–259.