



UNIVERSITE MONTPELLIER II
SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC

THESE de DOCTORAT

pour l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER II

Discipline : Mathématiques et modélisation

Ecole doctorale : I2S (Information, Structures, Systèmes)

Laboratoire d'accueil : CERFACS

Directeur de thèse : Franck Nicoud

présentée et soutenue publiquement

par

M. Olivier CABRIT

le 3 décembre 2009

MODELISATION DES FLUX PARIETAUX SUR LES TUYERES DES MOTEURS A PROPERGOL SOLIDE

composition du JURY

M. Stanislas	Professeur à l'Ecole Centrale de Lille	Président
P. Comte	Professeur à l'ENSMA, Poitiers	Rapporteur
P. Sagaut	Professeur à l'université Pierre et Marie Curie, Paris 6	Rapporteur
B. Mohammadi	Professeur à l'université de Montpellier II	Examineur
J. Couzi	Ingénieur chercheur au CEA / CESTA	Examineur
J. M. Déoclézian	Ingénieur à Snecma Propulsion Solide	Examineur
F. Nicoud	Professeur à l'université de Montpellier II	Directeur de Thèse

Un intellectuel assis ira toujours moins loin qu'un con qui marche.

Michel Audiard

Table des matières

Remerciements	1
Nomenclature	5
Introduction générale	9
Chapitre 1 : Cadre général de l'étude	17
1.1 Formulation et résolution des équations de conservation pour un fluide multi-espèces.	17
1.1.1 <i>Formulation analytique des équations de conservation.</i>	17
1.1.2 <i>Résolution numérique des équations de conservation</i>	24
1.2 Couche limite turbulente : description	34
1.2.1 <i>Présentation générale</i>	34
1.2.2 <i>Distinction des différentes régions caractéristiques</i>	41
1.2.3 <i>Couche limite turbulente dans une tuyère de moteur à propulsion solide</i>	44

1.3 Prédiction des flux pariétaux	50
1.3.1 <i>Corrélations théoriques et empiriques</i>	51
1.3.2 <i>Modèles de paroi pour la simulation numérique, état de l'art</i>	55
1.3.3 <i>Quelques mots sur la chaîne de calcul actuellement utilisée pour la conception des tuyères. Position de l'étude présente</i>	67

PARTIE I MODÉLISATION DES FLUX PARIÉTAUX SUR UNE TUYÈRE À PAROI INERTE

Chapitre 2 : Ecoulements réactifs à faible nombre de Mach sur paroi inerte	71
2.1 Introduction	73
2.2 Equations and numerical strategy	77
2.2.1 <i>Governing equations</i>	77
2.2.2 <i>Modeling of the transport terms</i>	80
2.2.3 <i>Set up of the simulations</i>	81
2.2.4 <i>Numerical solver</i>	86
2.3 DNS results	87
2.3.1 <i>Species mass fraction balances</i>	89
2.3.2 <i>Momentum balance</i>	98
2.3.3 <i>Energy balance</i>	99
2.3.4 <i>Comment on the Dufour effect</i>	100
2.4 Development of wall models	101
2.4.1 <i>Finding a function for the total shear stress</i>	102
2.4.2 <i>Finding a function for the total heat flux</i>	106
2.4.3 <i>Derivation of the coupled model</i>	112
2.4.4 <i>A priori tests</i>	114

2.4.5 <i>Adaptation of the wall model to the standard k-ϵ model for RANS calculations</i>	117
2.5 Conclusions	119
Chapitre 3 : Limites et extensions du modèle développé pour parois inertes	121
3.1 Transferts radiatifs	121
3.2 Gradient de pression longitudinal	122
Chapitre 4 : Implémentation d'un modèle de paroi dans un code de calcul – Tests <i>a posteriori</i>	129
4.1 Implémentation du modèle dans un code de calcul	129
4.1.1 <i>Commentaire général sur les modèles de paroi</i>	129
4.1.2 <i>Formulation de la loi couplée vitesse-température</i>	132
4.1.3 <i>Algorithme de résolution</i>	132
4.2 Tests <i>a posteriori</i>	134
4.2.1 <i>Données de référence, et définition du cas test</i>	134
4.2.2 <i>Tests pour les écoulements à faible gradient de température</i>	137
4.2.3 <i>Tests pour les écoulements dilatables</i>	143
PARTIE II MODÉLISATION DES FLUX PARIÉTAUX SUR UNE TUYÈRE À PAROI ABLATÉE	
Chapitre 5 : Description analytique des écoulements laminaires avec ablation des parois	151
Chapitre 6 : Simulation et analyse des couches limites sur parois ablatées	161
6.1 Introduction	163

6.2 Description of the simulations.	165
6.2.1 <i>Flow equations</i>	165
6.2.2 <i>Boundary condition for surface ablation.</i>	168
6.2.3 <i>Operating conditions and computational domain</i>	173
6.2.4 <i>Numerical method</i>	175
6.3 Statistical Procedure	177
6.4 Flow structure analysis	183
6.4.1 <i>Species conservation analysis</i>	183
6.4.2 <i>Momentum conservation balance</i>	185
6.4.3 <i>Energy conservation balance</i>	187
6.4.4 <i>Atom conservation balance</i>	191
6.5 Conclusions	196
Chapitre 7 : Modèle de paroi avec prise en compte de l'ablation	197
Conclusion générale	199
Bibliographie	205
ANNEXES	
Annexe A : Publication	i
Annexe B : Publication	ix

Remerciements

Cette thèse est le fruit d'un travail collaboratif entre l'Université de Montpellier 2, le CERFACS et Snecma Propulsion Solide. Il a été supporté financièrement par une bourse CNRS/DGA. Je tiens donc à remercier l'ensemble de ces acteurs qui m'ont permis d'effectuer cette thèse dans les meilleures conditions.

Je tiens à remercier sincèrement les membres du Jury pour avoir accepté de juger mon travail. Merci à Pierre SAGAUT et Pierre COMTE, tous deux rapporteurs de ce manuscrit, pour leurs remarques pointues qui ont largement contribué à l'amélioration de cette étude. Je remercie également Michel STANISLAS, Bijan MOHAMMADI et Jacques COUZI pour l'intérêt qu'ils ont montré pour ce travail.

Mes remerciements suivants s'adressent à Jean-Marc DÉOCLÉZIAN et à toute son équipe de Snecma Propulsion Solide, je pense notamment à Philippe AUBRUN et à Cédric DESCAMPS. Merci Jean-Marc d'avoir piloter cette thèse de façon adaptée aux besoins d'une activité de recherche. Nos échanges réguliers ont permis de trouver les chemins d'entente qui ont façonné ces trois années dans une atmosphère de confiance et de sérénité.

J'en viens à mon illustre directeur de thèse, Franck NICOUD, dit "*Francky*" dans les couloirs du CERFACS. Ces trois années à tes côtés ont été une expérience riche et formatrice sur tous les points, aussi bien scientifiques qu'humains. Merci d'avoir su gérer astucieusement ma personnalité, c'est sans masochisme aucun que je te suis maintenant reconnaissant d'avoir su délivrer les quelques coups derrière la nuque qui m'ont recadré aux bons moments. Ta source de savoir intarissable et tes rapports humains m'ont vite fait comprendre que j'étais tombé sur "*le bon*" directeur de thèse.

Remerciements

Je voudrais également remercier Thierry POINSOT de m'avoir accueilli dans l'équipe CFD qu'il anime avec dynamisme. Nos rares échanges scientifiques et les hebdomadaires "réunions AVBP" m'ont permis d'apprendre beaucoup. Je retiendrais de ces trois années les réflexions perspicaces issues de son esprit vivace et sa maîtrise de l'art de la communication. Je ne pensais pas en apprendre autant dans ce domaine avant d'arriver dans son équipe.

Une pensée chaleureuse va pour l'ensemble des personnes que j'ai pu solliciter au quotidien et qui m'ont transmis toutes les bases et les supports techniques et scientifiques dont j'avais amplement besoin. Je pense bien sûr à la Dream Team CSG, équipe joviale composée de dompteurs de supercalculateurs, de funambules sur lignes de code bugguées, et de polyglottes maîtrisant tous les langages. Merci pour votre aide et vos compétences, la vie ne serait pas ce qu'elle est sans vous.

Merci également à tous les permanents, doctorants et post-doctorants que j'ai côtoyé ces trois années. La liste est longue mais je m'aventure à en citer quelques uns, en espérant que les oubliés ne m'en voudront pas. Merci à Laurent GICQUEL pour son éclairage sur les côtés obscurs de la turbulence et sa disponibilité qui a souvent pallié à l'éloignement de mon directeur de thèse. Un grand salut pour Pablo STAFFELBACH et Olive VERMOREL, chefs d'orchestre du code AVBP. Mes pensées vont bien entendu à tous mes collègues aux côtés desquels j'ai eu la chance et l'honneur de partager trois bureaux différents, dans l'ordre chronologique : Laurent NYBELEN collisionneur de vortex, Camillo SILVA animateur radio sur "*Radio Colombie*", Matthieu BOILEAU et sa légendaire force tranquille, Nicolas AUBERT stagiaire *G.I. Joe*, et sur la fin Yannick HALLEZ qui m'en apprend tous les jours. Merci à tous les cinq pour votre compagnie agréable. Je voudrais aussi envoyer un clin d'oeil bien plus que symbolique à Simon MENDEZ et Olivier *Vermomo* VERMOREL (encore lui), duo de choc domiciliant dans ce bureau désormais mythique pour moi : vous m'avez vu débouler plus d'une fois la première année de thèse, avec mon lot de questions en tout genre, souvent inutiles, quelques fois tordues, parfois sans réponses. Merci pour votre patience et vos enseignements sages et didactiques. Une pensée pour Maître Nicolas LAMARQUE, distilleur de bons conseils numériques, tant que je t'aurais à portée de mains Nico mon cerveau ne fera pas l'effort d'en apprendre beaucoup plus dans cette matière. Merci aux membres du "*bureau des fous*" qui ont imprimé le rythme dans les algécos : Florent DUCHAINE gourou discret et insoupçonné du bureau ; Anthony *Totony* ROUX tireur d'élite manipulant la Winchester avec brio quand un indien hostile se présente dans son bureau (si jamais tu lis un jour cette page, sache que tu me dois toujours 20 euros...); et Matthieu LEYKO véritable main verte de la CFD, disciple de Nicolas le jardinier, toujours disponible pour mes questions farfelues même à des heures tardives (désolé pour les maux de crâne Matthieu). J'ai aussi une attention particulière pour Éléonore RIBER remonteuse de moral en pleine tourmente, Marlène SANJOSE acrobate au comportement absynthotiquement imprévisible (j'ai bien cru que la barrière aurait raison de toi...), Laurent *Papi* BENOIT professeur d'histoire et pourtant lauréat du prix de l'innovation scientifique (cherchez l'erreur...), Valérie *Val* AUFFRAY *120dB* et Claude SENSAU partenaires toujours volontaires pour lancer un petit apéro, Guilhem LACAZE l'homme qui soutient plus vite qu'il ne s'extirpe d'une 106 Green (Guilhem, je suis fan de ton "*grand sgueigue*"), Benoît *Baby*

Soupape ENAUX aussi dit “*le mac*” dans le milieu, les 4 poètes du couloir combustion, l’extravagant Yann COLIN, Jean-Mathieu SENONER et Thomas SCHMITT les colocs perfectionnistes, Jorge AMAYA et Marta GARCIA les deux rescapés sympathiques de l’ancien *Immigration Office*, Felix JAEGLE dandy de la CFD et compagnon pariétal (merci pour le joli bébé...), Benedetta FRANZELLI toute en couleur (même les chaussures)... Merci à tous ceux que j’oublie, je me suis régalaé durant ces trois années au CERFACS.

Je voudrais également associer à ces remerciements tous mes potos (prononcer “*poto*”), ceux qui m’ont tiré du boulot dans les moments où il fallait absolument que je travaille (mais bien sûr !), ceux qui m’ont forcé à prendre RTT et congés payés, en somme tous ceux qui ont tenté de faire en sorte que cette thèse soit un échec. Je pense notamment aux membres fondateurs du moustachement vôtre *Canadian Moustache Club* : Guillaume, Quentin, Xav et Boule qui au terme d’un voyage en campervan m’ont bien fait douter quant à ma motivation d’entamer cette thèse. Les vieux de la vieille : les deux JBs (le gros autant que le barbu), le Black, le père Cladiste, le Boule, le Barro, le redoutable Pont.... Merci les gars, vous avez vraiment tout tenté ! Merci également aux compagnons de l’apéro du mercredi et du jeudi soir (parfois du vendredi, voire du samedi) : Olive, Mathieu et Boule, je n’ai jamais autant apprécié un match de foot qu’en votre compagnie... Je vous l’avoue, ce n’était qu’un prétexte pour moi, j’espère que pour vous aussi ! Merci aux homologues thésards, Jule, Olive et Boule (ah bravo, ça fait quatre fois que je te remercie !) pour les sessions “*décompression*”. Merci à tous les toulousains (vous resterez anonyme, j’ai pas envie de faire des jaloux), sans oublier Bouille pour ses relectures candides, et mon ancien coloc le brillantissime Boubou (ça y est, vous êtes jaloux ?). Merci enfin à Vince, l’unique, le meilleur, mon “*binôme de choc*” qui me suit depuis maintenant 10 ans, depuis cette erreur de manip en T.P. soudage impossible de nous dessouder.

J’en arrive bientôt au terme, et comme les meilleurs arrivent toujours sur la fin j’en profite pour remercier Nina, Rolls-Royce des copines de luxe (devrais-je dire BMW ?) qui n’a jamais dérapé sur cette route souvent sinueuse qui mène à la période de rédaction, et cela même quand il faisait “*froid frigo*”. Merci de m’avoir supporté (dans les deux sens du terme)...

Merci enfin à toute ma famille, mes indispensables parents, Laurent, Alice, la toute nouvelle Éma (t’en fais pas, tes cheveux finiront bien par pousser !!!), sans oublier Éva mon incroyable grand-mère, et pour terminer, Pierre le papi le plus classe du monde, passionné d’aéronautique. Papi, c’est à toi que je dédie cette thèse.

Nomenclature

Lettres romaines

A	pré-exponentielle dans la loi d'Arrhenius, [unités <i>CGS</i>]
B_q	coefficient d'isothermicité, $B_q = T_\tau/T_w$
C_p	capacité calorifique à pression constante, [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$]
C_v	capacité calorifique à volume constant, [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$]
D_h	diamètre hydraulique, $D_h = 4 \times$ section de passage/périmètre mouillé, [m]
D_{kl}	coefficient de diffusion massique de l'espèce k dans l'espèce l , [$m^{-2} \cdot s^{-1}$]
$\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$	coefficient binaire de diffusion massique de l'espèce k dans l'espèce l , [$m^{-2} \cdot s^{-1}$]
\mathcal{D}_k	coefficient de diffusion massique équivalent de l'espèce k dans son mélange, [$m^{-2} \cdot s^{-1}$]
E_a	énergie d'activation dans la loi d'Arrhenius, [$J \cdot mol^{-1}$]
E	énergie totale non-chimique massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
e	énergie spécifique massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
e_s	énergie sensible massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
e_t	énergie totale massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
H	enthalpie totale non-chimique massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
h	enthalpie sensible massique, [$J \cdot kg^{-1}$] / hauteur ou demi-hauteur du canal, [m]
h_s	enthalpie sensible massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
h_t	enthalpie totale massique, [$J \cdot kg^{-1}$]
K	paramètre d'accélération, $K = (\nu_\infty/u_\infty^2) (\partial u_\infty/\partial x)$
Le_k	nombre de Lewis de l'espèce k , $Le_k = \lambda/(\rho C_p \mathcal{D}_k) = Sc_k/Pr$
\dot{m}	débit massique, [$kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$]
Pr	nombre de Prandtl, $Pr = \mu C_p/\lambda$

Nomenclature

p	pression thermodynamique, $[Pa]$
\mathcal{Q}	terme source volumique d'énergie, $[W \cdot m^{-3}]$
\mathcal{Q}^{rad}	terme source radiatif, $[W \cdot m^{-3}]$
q	flux de chaleur, $[W \cdot m^{-2}]$
R	constante des gaz parfaits, $R = 8.314 J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
Re	nombre de Reynolds, $Re = uh/\nu$
Re_τ	nombre de Reynolds de friction, $Re_\tau = u_\tau h/\nu_w$
\dot{r}	taux de récession de surface, $[m \cdot s^{-1}]$
Sc_k	nombre de Schmidt de l'espèce k , $Sc_k = \nu/D_k$
S_i	terme source de quantité de mouvement dans la direction i , $[Pa \cdot m^{-1}]$
\dot{s}_k	taux de production surfacique de l'espèce k , $[kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}]$
T	température, $[K]$
T_τ	température de frottement, $T_\tau = q_w/(\rho_w Cp u_\tau)$, $[K]$
u_i	vecteur vitesse, $[m \cdot s^{-1}]$
u	composante de la vitesse dans la direction \vec{x} , $[m \cdot s^{-1}]$
u_τ	vitesse de frottement, $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho_w}$, $[m \cdot s^{-1}]$
$V_{k,i}$	vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i , $[m \cdot s^{-1}]$
v	composante de la vitesse dans la direction \vec{y} , $[m \cdot s^{-1}]$
W	masse moléculaire du mélange gazeux, $[kg \cdot mole^{-1}]$
W_k	masse moléculaire de l'espèce k , $[kg \cdot mole^{-1}]$
w	composante de la vitesse dans la direction \vec{z} , $[m \cdot s^{-1}]$
X_k	fraction molaire de l'espèce k
Y_k	fraction massique de l'espèce k

Lettres grecques

χ_k	rapport de diffusion thermique de l'espèce k (coefficient de transport qui intervient dans l'effet Dufour)
η	viscosité en volume, $[Pa \cdot s]$
κ	constante de von Kármán, $\kappa = 0.41$
λ	coefficient de conduction thermique, $[W \cdot m^{-1}]$
μ	viscosité dynamique, $[Pa \cdot s]$
ν	viscosité cinématique, $\nu = \mu/\rho$, $[m^2 \cdot s^{-1}]$
ν_k	coefficient stœchiométrique de l'espèce k
$\dot{\omega}$	taux de production volumique de l'espèce k , $[kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}]$
ψ_a	fraction massique atomique de l'atome a
ρ	masse volumique, $[kg \cdot m^{-3}]$
τ	contrainte de cisaillement, frottement, $[Pa]$

Indices

a	fait référence à l'élément atomique a
b	quantité de mélange (<i>bulk</i> en anglais)
c	quantité évaluée au centre du canal, ou référence à l'espèce carbone
f	quantité de film, évaluée à la température $T_f = (T_w + T_b)/2$
i, j	fait référence à la direction des composantes d'un vecteur
k	fait référence à l'espèce k
rms	écart type d'une variable (<i>root-mean-square</i> en anglais)
sgs	grandeur de sous maille au sens LES (<i>subgrid scale</i> en anglais)
t	grandeur turbulente au sens RANS
τ	grandeur pariétale caractéristique ($Re_\tau, u_\tau, T_\tau, \dots$)
w	quantité évaluée à la paroi

Exposants

+	normalisation par des unités pariétales
'	fluctuation au sens de Reynolds, telle que pour une quantité f , $f = \bar{f} + f'$, et $\bar{f}' = 0$
"	fluctuation au sens de Favre, telle que pour une quantité f , $f = \tilde{f} + f''$, et $\tilde{f}'' = 0$
i	valeur d'une quantité à un instant initial de référence

Opérateurs

$\bar{\cdot}$	moyenne statistique au sens de Reynolds (sur un ensemble de réalisations et/ou dans une direction homogène)
$\tilde{\cdot}$ ou $\{\cdot\}$	moyenne statistique au sens de Favre, pour une quantité f , $\tilde{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$

Abréviations

DNS	simulation numérique directe (<i>Direct Numerical Simulation</i> en anglais)
LES	simulation aux grandes échelles (<i>Large-Eddy Simulation</i> en anglais)
RANS	équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Reynolds (<i>Reynolds-Averaged Navier-Stokes</i> en anglais)

Introduction générale

Les moteurs à propergol solide font maintenant partie des applications courantes dans le secteur aéronautique. Leur utilisation est principalement destinée à la mise en orbite des satellites, et au transport de charges explosives pour des applications militaires. Parmi les multiples possibilités imaginées pour le transport des charges utiles, la propulsion chimique reste à ce jour la plus réaliste. Dans ce cadre, l'utilisation de propergols solides est souvent privilégiée car on aboutit à des choix technologiques plus simples qu'avec des ergols liquides.

Un schéma de principe des moteurs à propergol solide est présenté sur la figure 1. Le combustible et le comburant sont mélangés dans une même pâte, stockée sous forme de blocs à l'intérieur du lanceur. La combustion anaérobie du propergol est initiée par un allumeur situé dans le fond avant de l'appareil. La chambre monte alors en pression sous l'effet de l'augmentation de température et des masses gazeuses libérées par la combustion. A la sortie de la chambre de combustion, les produits de combustion sont accélérés à l'intérieur de la tuyère, fournissant la poussée nécessaire au lanceur pour transporter la charge utile.

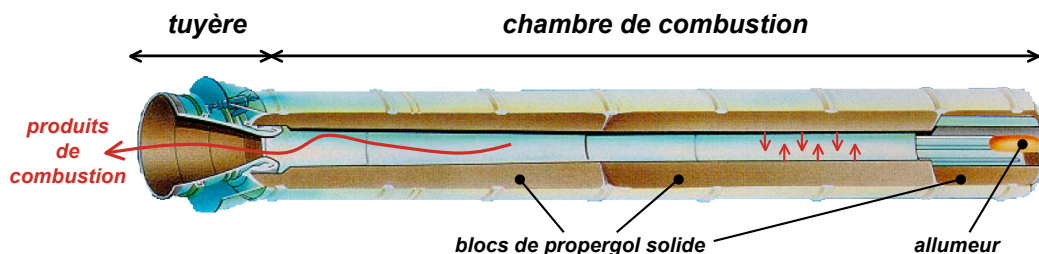


Figure 1 : Schéma représentant une coupe d'un booster MPS P230 de la fusée Ariane 5.

Si le principe de cette technologie reste simple, sa mise en oeuvre est très compliquée. En effet, on demande à ces lanceurs d'accueillir des charges utiles de plus en plus lourdes, pour un encombrement de l'appareil le plus restreint possible. Ce cahier des charges conduit à l'emploi de propergols hautement énergétiques délivrant des gaz de combustion à haute température (plus de $3000K$), et générant une pression élevée à l'intérieur de la chambre (jusqu'à 100 bars). Pour donner quelques ordres de grandeur, les boosters de la fusée Ariane 5 participent à 90% de la puissance du lanceur au décollage, délivrant chacun $6470kN$ de poussée. Un booster mesure $27m$ de haut, pour un diamètre de $3m$, et embarque 238 tonnes de propergol qui brûlent pendant les 130 premières secondes du tir. La pression à l'intérieur de la chambre atteint alors 60 bars, et la température des gaz de combustion $3500K$.

Les sollicitations mécaniques et thermiques auxquelles sont soumises les tuyères dépendent directement de l'état thermodynamique des gaz d'échappement. Afin d'illustrer l'intensité énergétique du processus d'éjection des gaz brûlés, on présente sur la figure 2 une photo du décollage de la fusée Ariane 5. A la vue de cette image, on devine la sévérité des contraintes thermo-mécaniques, ainsi que la nature complexe de l'écoulement qui se développe à l'intérieur des tuyères.



Figure 2 : Décollage de la fusée Ariane 5 (photo réalisée par l'ESA et le CNES).

Dans de telles conditions, le choix des matériaux est primordial pour assurer l'intégrité des composants. Les composites carbone/carbone sont ainsi retenus car ils offrent un excellent compromis entre densité et tenue thermo-mécanique, et leur coefficient de dilatation reste faible. Outre ces propriétés, les matériaux à base de carbone sont également exposés au phénomène d'ablation thermo-chimique. En effet, parmi la centaine d'espèces chimiques présentes dans les gaz d'échappement, les espèces telles que H_2O , CO_2 , OH ou H_2 conduisent à des réactions hétérogènes de surface qui ablatent la structure des tuyères. D'une certaine façon, cette caractéristique protège la structure car elle permet de réduire considérablement le flux de chaleur entrant dans le solide. En contrepartie, le phénomène doit être parfaitement contrôlé car il s'accompagne obligatoirement d'une récession de la surface qui change la géométrie de la veine interne. D'un point de vue macroscopique, l'ablation modifie la section de passage de l'écoulement, notamment au niveau du col de la tuyère. Les performances du lanceur s'en trouvent modifiées, et la récession de la surface doit absolument être maîtrisée lors de la phase de conception. D'un point de vue microscopique, la dégradation du matériau se traduit par l'apparition de rugosités. Comme le montre la figure 3, leur taille est directement liée à la nature de l'écoulement au-dessus des parois. Dans le cas des matériaux composites carbone/carbone, la taille caractéristique des rugosités découle également de l'espacement des baguettes de carbone qui composent l'architecture primaire du matériau. D'une manière générale, le phénomène d'ablation contraint fortement l'écoulement de proche-paroi. Il s'agit donc d'un élément clé pour la conception des tuyères.

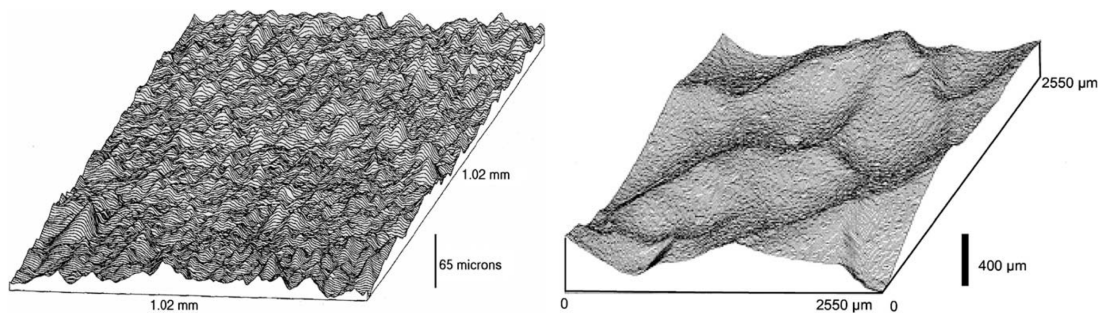


Figure 3 : Mise en évidence de l'interaction entre une paroi en graphite polycristallin, et un écoulement contenant des espèces oxydantes. Ablation en régime laminaire (à gauche) et turbulent (à droite). Visualisation dans Vignoles et al. [245].

• Contexte industriel, et objectifs de la thèse

Snecma Propulsion Solide est un acteur majeur dans la mise au point et la fabrication des tuyères employant des matériaux composites carbone/carbone tissés dans quatre dimensions (voir la figure 4). Il intervient notamment à l'échelle européenne pour la réalisation de la tuyère des boosters de la fusée Ariane 5, mais aussi pour la conception de moteurs de missiles stratégiques français. Ces dernières années, l'activité de Snecma Propulsion Solide a été principalement dirigée vers la réalisation du missile balistique stratégique M51, commandé par la Délégation Générale

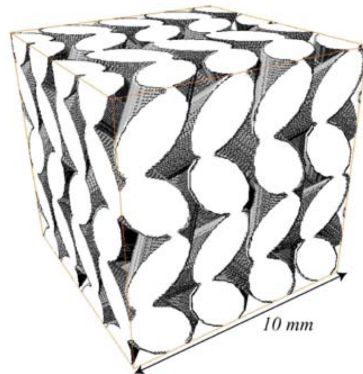


Figure 4 : Représentation de l'architecture d'un matériau composite carbone/carbone 4D.

de l'Armement (DGA), et emportant plusieurs têtes nucléaires.

Pour des raisons financières, le nombre d'essais de mise au point d'un tel propulseur est limité, et le nombre d'itérations sur sa définition doit être réduit au minimum : il faut faire bon du premier coup. Cette contrainte oblige les ingénieurs à suivre deux stratégies pour la conception de nouveaux produits :

- les architectures des lanceurs sont extrapolées de l'existant, en maîtrisant au mieux les risques de développement, ce qui limite les sauts technologiques ;
- en compensation de la diminution du nombre d'essais, la modélisation numérique joue un rôle de plus en plus important.

L'utilisation de méthodes numériques fiables est donc indispensable à la réalisation d'avancées technologiques en propulsion solide. Pour la prédiction des sollicitations thermiques, mécaniques, et chimiques auxquelles doivent résister les tuyères, Snecma Propulsion Solide dispose à ce jour d'une chaîne de calcul complexe. Elle s'articule autour de trois modules :

- un code de type fluide parfait, qui résout l'écoulement au coeur de la veine ;
- un code de couche limite, pour résoudre l'écoulement de proche-paroi ;
- un code de thermochimie (THERMO, code SPS). Il est basé sur l'utilisation de corrélations empiriques pour la prédiction du flux de chaleur et des flux d'espèces à l'interface fluide/structure lorsque le matériau est sujet au phénomène d'ablation.

Le couplage entre ces différents éléments reste partiel ce qui ne facilite pas leur utilisation. De plus, cette chaîne ne traite qu'une zone bien précise à l'intérieur du propulseur, et ne permet pas encore de prendre en compte la totalité des phénomènes physiques qui caractérisent l'écoulement (effets tri-dimensionnels, réactions chimiques, rayonnement, effets poly-phasiques). Dans l'optique d'une amélioration de sa chaîne de calcul, Snecma Propulsion Solide souhaite donc se munir d'un outil plus souple, capable de prendre en compte l'ensemble des effets multi-physiques, et de calculer à terme l'intégralité du propulseur. Le code de calcul CEDRE de l'ONERA a été retenu comme plate-forme d'accueil des développements réalisés dans ce cadre.

La mise en place d'une simulation numérique complètement résolue (représentant l'ensemble des échelles spatio-temporelles) de l'écoulement à l'intérieur d'un propulseur reste à ce jour parfaitement utopique. Non seulement car la puissance des calculateurs actuels ne permet pas encore de résoudre finement l'ensemble des échelles intrinsèques aux écoulements turbulents à haut nombre de Reynolds, mais surtout parce qu'un tel calcul ne correspond pas aux contraintes économiques et temporelles avec lesquelles les industriels doivent composer. Pour obtenir un résultat à moindre coût avec un temps de restitution raisonnable, une des stratégies consiste à modéliser certaines parties de l'écoulement. Ainsi, les méthodes RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) sont souvent utilisées par les industriels pour modéliser le comportement moyen d'un écoulement turbulent. Pour diminuer le nombre de points et réduire encore le coût de la simulation, on utilise également des modèles de paroi. Avec cette approche, les forts gradients qui interviennent près de la paroi ne sont pas résolus sur une grille fine : la maille de paroi reste grossière, et les flux pariétaux sont obtenus à partir d'une technique d'intégration (algébrique ou numérique) d'une forme simplifiée des équations de Navier-Stokes.

L'objectif de cette étude est de progresser dans le développement de modèles de paroi pour les écoulements de tuyère. Si de nombreuses approches de modélisation ont déjà été explorées dans la littérature, la plupart d'entre elles sont consacrées aux écoulements canoniques de référence : plaque plane, paroi lisse, nombre de Mach faible, fluide mono-espèce (de l'air en général), transfert thermique modéré. Ces méthodes fonctionnent très bien pour ce genre de configurations. Malheureusement, l'écoulement est beaucoup plus complexe dans une tuyère et plusieurs effets physiques doivent être intégrés dans les modèles de paroi :

- l'écoulement passe d'un régime subsonique à un régime supersonique ;
- le nombre de Prandtl moléculaire est différent de celui de l'air ;
- les transferts thermiques sont conséquents : la différence de température entre la paroi et le fluide atteint plusieurs milliers de Kelvin dans les phases transitoires. Ces écarts de température engendrent des variations importantes des propriétés du fluide à l'intérieur de l'écoulement (masse volumique, viscosité dynamique, capacité calorifique) ;
- l'écoulement est poly-phasique, il contient aussi bien des particules liquides que solides ;
- l'écoulement est multi-espèces, réactif ;
- l'accélération du fluide au travers de la tuyère soumet l'écoulement à un gradient de pression longitudinal qui peut mener au décollement ou à la relaminarisation de la couche limite ;
- la paroi n'est pas plane et sa courbure peut entraîner l'apparition de tourbillons de Görtler : instabilité hydrodynamique qui se caractérise sous la forme de paires de tourbillons contrarotatifs allongés sur la paroi dans la direction de l'écoulement ;
- les transferts radiatifs doivent être considérés étant donné l'aspect multi-espèces du fluide et les températures mises en jeu ;
- la paroi est ablative. Elle se comporte donc comme une surface transpirante, lieu de flux convectifs d'espèces chimiques et de chaleur ;
- la rugosité des parois évolue au cours du tir, à cause du phénomène d'ablation et de son interaction avec les structures turbulentes de l'écoulement.

Chacun de ces points représente un challenge à part entière en termes de modélisation, et à ce jour, aucun modèle de paroi ne permet de prendre en compte la totalité des phénomènes. Les méthodes industrielles se basent donc sur certaines hypothèses, et négligent des effets physiques. La justification de ces approximations manque souvent de données expérimentales fines, notamment car l'instrumentation de telles applications est délicate, voire impossible. Concernant les mesures de l'ablation des parois, on se contente par exemple d'un relevé de l'état de surface avant et après le tir.

Cette étude s'inscrit dans la continuité du travail de Artal [9], qui développe dans sa thèse un modèle de paroi pour les écoulements réactifs sur paroi inerte. La philosophie reste donc la même : générer des données numériques de référence pour analyser la structure de l'écoulement, et inclure le maximum d'effets physiques dans des modèles de type "loi de paroi". L'exercice est d'envergure, mais l'objectif principal est d'avancer sur la résolution de la question suivante : *est-on capable de développer des lois de paroi intégrant des effets multi-physiques, ou doit-on forcément utiliser une autre approche¹ plus coûteuse pour obtenir une prédiction fiable des flux pariétaux ?*

Parmi tous les phénomènes physiques intervenant dans la région pariétale, l'étude se concentrera principalement sur l'aspect multi-espèces du fluide, l'impact des réactions chimiques à l'intérieur de l'écoulement, la prise en compte de la variation de masse volumique due à un gradient de température significatif, et le phénomène d'ablation de la paroi. La question du gradient de pression longitudinal sera également abordée, tout comme la problématique du transfert radiatif.

On progressera principalement sur la question de l'ablation des parois. Les applications industrielles intéressées pas cette problématique restent marginales², leur instrumentation expérimentale est souvent techniquement difficile, et les études qui s'y rapportent sont généralement soumises à des clauses de confidentialité. Tous ces facteurs contribuent à une absence évidente de données de référence dans la littérature. Dans cette étude, on propose donc d'utiliser une approche par simulation numérique directe d'écoulement turbulent en canal plan périodique avec ablation des parois. Cette configuration permet de générer des données de turbulence pariétale représentatives d'une situation réelle, sur lesquelles on peut se baser pour développer des modèles de paroi. Bien que la problématique de la rugosité des parois soit indissociable du phénomène d'ablation, on précise que cette question ne sera pas abordée dans ce document.

¹Dans un code de calcul RANS, l'approche bas-Reynolds permet par exemple de résoudre l'écoulement jusqu'à la paroi. Une grille de calcul fine est alors utilisée ce qui rend le calcul plus coûteux.

²Sur un moteur à propergol solide, la problématique d'ablation intervient au niveau de la tuyère, mais aussi dans le processus de combustion du propergol, et sur les protections thermiques d'inter-segments [165]. Outre les moteurs à propergol solide, l'ablation des parois est également un point crucial qui doit être considéré pour le dimensionnement des boucliers de protection thermique des capsules spatiales et des corps de réentrée atmosphérique [244, 243].

• **Organisation du manuscrit**

Dans un premier chapitre, on présente les notions de base qui dessinent le contour de cette étude. Le chapitre est divisé en trois sections qui pourront être lues séparément :

- la première section présente les équations de conservation qui caractérisent les écoulements multi-espèces réactifs. On y décrit également les méthodes numériques utilisées pour ce travail de thèse ;
- la deuxième section est consacrée à la description des couches limites turbulentes. On introduit d'abord les études de référence sur des écoulements canoniques, avant de présenter les quelques études qui abordent les aspects physiques intervenant dans les tuyères des moteurs à propergol solide ;
- la troisième section présente enfin les différentes stratégies possibles en termes de modèle de paroi. On positionne les lois de paroi (approche retenue dans cette étude) par rapport aux méthodes concurrentes. On présente également un tableau qui synthétise les différents travaux traitant de la modélisation des écoulements pariétaux en situation complexe. Il pourra être utilisé pour de futures investigations.

Le manuscrit est ensuite scindé en deux parties qui reprennent l'essentiel des travaux réalisés au cours de la thèse :

- la première partie est consacrée aux écoulements sur paroi inerte. On y présente le développement d'une loi de paroi pour les écoulements réactifs dilatables. On discute ensuite des extensions possibles du modèle pour prendre en compte le rayonnement et le gradient de pression longitudinal. Des tests *a posteriori* sont finalement réalisés avec une version simplifiée de la loi de paroi (la partie du modèle qui prend en compte les réactions chimiques est négligée). Cette procédure met en évidence le bon comportement du modèle lorsque l'écoulement est subsonique et soumis à un gradient de température significatif ;
- dans la deuxième partie, on ne s'intéresse qu'à la prise en compte du caractère ablatif des parois. Une solution analytique pour un écoulement laminaire est tout d'abord dérivée. Elle permet de valider la condition limite spécialement développée pour la réalisation des simulations numériques directes de cette étude. On discute alors la méthodologie qui permet d'obtenir des données de couche limite sur paroi ablatable, et on examine le comportement physique de l'écoulement suivant les espèces oxydantes considérées et l'intensité des réactions hétérogènes de surface. Dans un dernier chapitre, inaccessible dans cette version pour des raisons de confidentialité, on présente enfin une loi de paroi qui prend en compte le phénomène d'ablation.

*Note : les chapitres 2, 5 et 6 sont des articles. Le chapitre 2 a été accepté dans le journal *Physics of Fluids*, le chapitre 5 a été soumis dans *Physics of Fluids* sous la forme d'une lettre, et le chapitre 6 a été soumis dans *Journal of Turbulence*. Ils sont donc écrits en anglais.*

CHAPITRE 1

Cadre général de l'étude

Ce chapitre a pour but de dresser de façon synthétique le cadre général des travaux présentés dans ce manuscrit. Il est divisé en trois sections qui reprennent les trois thèmes conducteurs de cette étude :

- présentation et résolution numérique des lois de conservation d'un écoulement (section 1.1) ;
- description de l'interaction entre une paroi et un écoulement turbulent (section 1.2) ;
- état de l'art succinct sur les approches de prédiction des flux pariétaux (section 1.3).

Ces trois composantes font partie des connaissances de base du mécanicien des fluides. Elles sont présentées ici en expliquant le lien avec les choix méthodologiques retenus pour cette étude.

Ce genre de synthèse a été proposée dans des travaux de thèse récents [67, 9, 149]. Le lecteur aguerri est donc invité à se rendre directement aux chapitres suivants.

1.1 Formulation et résolution des équations de conservation pour un fluide multi-espèces.

1.1.1 Formulation analytique des équations de conservation

La description analytique de la mécanique des fluides repose sur des propriétés de mécanique des milieux continus. Pour utiliser ce formalisme, le nombre de Knudsen, Kn , défini comme le

rapport entre le libre parcours moyen, \mathcal{L} , et une dimension caractéristique de l'écoulement, L , doit rester suffisamment faible¹ (largement inférieur à 10^{-3}). Cette condition assure qu'une particule fluide du système considéré est assez grande pour contenir un échantillon suffisant de molécules, et assez petite pour être considérée comme ponctuelle par rapport à l'écoulement macroscopique.

En appliquant le principe de conservation de la masse, les lois de Newton (bilan des forces), et le premier principe de la thermodynamique (conservation de l'énergie) sur une particule fluide, des équations de conservation peuvent être formulées [15, 42, 137]. Le système regroupant ces propriétés est connu sous le nom des équations de Navier-Stokes.

1.1.1.a) Equations de Navier-Stokes

Note : dans tout le document, on utilise la règle de sommation d'Einstein dans l'écriture des équations.

On peut trouver le développement des équations de conservation pour les fluides compressibles, multi-espèces, réactifs, dans les livres classiques sur le sujet [253, 80, 183]. Dans la forme présentées ci-après, les variables retenues pour décrire les lois de conservation sont la masse volumique ρ , les fractions massiques Y_k , le vecteur vitesse u_i , l'énergie totale e_t et la pression p :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \mathcal{S}_i \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho e_t u_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} (p u_i) + \mathcal{Q}^{\text{rad}} + \mathcal{Q} + u_i \mathcal{S}_i \quad (1.4)$$

$$\frac{p}{\rho} = r T \quad (1.5)$$

¹Au contraire, si le nombre de Knudsen est de l'ordre de l'unité, on passe dans le domaine de la mécanique des milieux raréfiés. Les équations de Navier-Stokes ne sont plus valides et on doit utiliser un autre formalisme pour décrire le mouvement des particules. Par exemple, les équations de Burnett pour des écoulements transitionnels ($10^{-1} < Kn < 10$) ou les équations de Lattice Boltzmann pour les écoulements moléculaires ($Kn > 10$). Ces considérations intéressent surtout des applications de type microfluidique.

Ces équations correspondent respectivement à l'expression de la conservation de la masse, des espèces, de la quantité de mouvement, de l'énergie totale, et à l'équation d'état des gaz parfaits. Dans ces équations, on constate la présence du terme $V_{k,i}$, appelé vitesse de diffusion, qui caractérise les propriétés du transport moléculaire au sein du mélange. Cet aspect sera développé dans la section qui suit (section 1.1.1.b)). Le terme $\dot{\omega}_k$ représente le terme de production/consommation massique de l'espèce k piloté par l'activité des réactions chimiques (voir section 1.1.1.c)), Q^{rad} représente le terme source radiatif, S_i l'action d'une force agissant en volume dans la direction i (le terme de flottabilité par exemple, ou un terme de forçage numérique), et Q un terme source d'énergie (il peut représenter par exemple le dépôt d'énergie apportée par une étincelle, ou un terme de forçage numérique comme ce sera le cas dans cette étude).

L'équation d'état des gaz parfaits est utilisée ici pour fermer le système d'équations ce qui suppose qu'aucun effet "gaz réel" ne sera considéré dans cette étude². Ainsi, la pression p , la masse volumique ρ , et la température T sont reliées entre elles par la constante des gaz du mélange :

$$r = \frac{W}{R} \quad (1.6)$$

où $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ représente la constante des gaz parfaits, et W la masse moléculaire moyenne du mélange :

$$W = \sum_k X_k W_k = \left(\sum_k \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (1.7)$$

avec X_k la fraction molaire de l'espèce k dans le mélange, et W_k la masse moléculaire de l'espèce k . On rappelle que les fractions molaires et massiques sont reliées par la relation :

$$X_k W_k = Y_k W \quad (1.8)$$

Le tenseur des contraintes visqueuses τ_{ij} est donné par la relation :

$$\tau_{ij} = \left(\eta - \frac{2}{3} \mu \right) \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.9)$$

où δ_{ij} représente le symbole de Kronecker ($\delta_{ij} = 1$ si $i = j$, sinon $\delta_{ij} = 0$), μ est la viscosité dynamique (reliée à la viscosité cinématique par la relation $\nu = \mu/\rho$), et η est la viscosité en volume. La viscosité en volume est souvent négligée, mais en réalité cette hypothèse ne se justifie que pour des écoulements à divergence de vitesse nulle (lorsque le nombre de Mach est faible par exemple). En effet, comme le précise Giovangigli [80], le rapport des viscosités η/μ est généralement de l'ordre de l'unité, et dépend fortement du mélange considéré. Par exemple, à température ambiante, des expériences utilisant l'absorption des ondes acoustiques ont révélées

²Pour les gaz "réels", l'équation d'état est souvent remplacée par une équation du type Peng-Robinson [175]. Les relations liant les variables thermodynamiques sont elles aussi modifiées ce qui complique sérieusement les équations. Pour une introduction à la simulation numérique des gaz réels, on pourra se référer à la thèse de Schmitt [205].

que $\eta/\mu = 1.3$ pour du méthane, $\eta/\mu = 0.6$ pour du diazote, et $\eta/\mu = 34$ pour du dihydrogène. Dès que l'écoulement est à divergence de vitesse non-nulle, l'approximation qui consiste à négliger η par rapport à μ est donc sévère et doit être vérifiée suivant les mélanges étudiés.

Le flux de chaleur associé à la conservation de l'énergie totale, e_t , est donné par la relation :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{Fourier}} + \underbrace{\rho \sum_k h_{s,k} Y_k V_{k,i} + \rho \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k V_{k,i}}_{\text{diffusion moléculaire multi-espèces}} + \underbrace{p \sum_k \chi_k V_{k,i}}_{\text{Dufour}} \quad (1.10)$$

dans laquelle $h_{s,k}$ est l'enthalpie sensible massique de l'espèce k , $\Delta h_{f,k}^0$ l'enthalpie de formation massique de l'espèce k définie pour une température de référence T_0 , λ représente le coefficient de diffusion thermique du mélange, et χ_k le rapport de diffusion thermique de l'espèce k . On distingue trois effets dans l'expression du flux de chaleur de l'énergie totale : le flux de Fourier qui correspond à la diffusion de la température par effet moléculaire, un terme multi-espèces de diffusion moléculaire qui caractérise le transport de l'enthalpie de chaque espèce par sa vitesse de diffusion, et le terme de Dufour dû aux gradients de concentration des espèces. Le terme de Dufour est généralement négligé. Pour les écoulements étudiés dans ce document, nous verrons au chapitre 2 que cette hypothèse est vérifiée.

Il est important de préciser que plusieurs variables sont possibles pour décrire la conservation de l'énergie d'un fluide multi-espèces. On distinguera notamment les notions d'énergie et d'enthalpie : l'énergie donne une vision à volume constant du système considéré, alors que l'enthalpie donne plutôt une vision à pression constante. Pour chaque espèce, on peut alors écrire une forme dite "sensible" (liée uniquement à l'état thermodynamique de l'espèce), ou une forme dite "spécifique" (forme sensible à laquelle on ajoute l'enthalpie standard de formation³ de l'espèce, aussi appelée partie "chimique"). Un récapitulatif de ces variables est donné dans la table 1.1 où apparaissent les grandeurs $C_{v,k}$ et $C_{p,k}$, respectivement les capacités calorifiques massiques à volume constant et à pression constante de l'espèce k .

forme	énergie	enthalpie
sensible	$e_{s,k} = \int_{T_0}^T C_{v,k} dT - RT_0/W_k$	$h_{s,k} = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT$
spécifique = sensible + chimique	$e_k = e_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0$	$h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0$

Table 1.1 : Variables possibles pour représenter l'énergie associée à une espèce k . Enthalpies et énergies sont reliées de la manière suivante : $e_{s,k} = h_{s,k} - p_k/\rho_k$ et $e_k = h_k - p_k/\rho_k$, avec $\rho_k = \rho Y_k$ et $p_k = \rho_k RT/W_k$ la pression partielle de l'espèce k ($\sum_k p_k = p$).

³Enthalpie nécessaire à la formation de l'espèce à partir des corps purs simples (corps formé d'un élément sous forme moléculaire ou non, O_2 ou C par exemple) pris dans l'état standard à la température T_0 , et $P_0 = 1bar$.

1.1. Formulation et résolution des équations de conservation pour un fluide multi-espèces.

En ce qui concerne la description de l'énergie (ou enthalpie) associée au mélange complet, on pourra faire la différence entre les formes, "sensibles", "chimiques", "spécifiques", "cinétiques", "totales non-chimiques", ou encore "totales". La table 1.2 présente ces différentes formes, dans lesquelles apparaissent les grandeurs C_v et C_p , respectivement les capacités calorifiques massiques du mélange à volume constant et pression constante. Elle sont définies de la façon suivante : $C_v = \sum_k C_{v,k} Y_k$ et $C_p = \sum_k C_{p,k} Y_k$.

forme	énergie	enthalpie
sensible	$e_s = \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0/W$	$h_s = \int_{T_0}^T C_p dT$
spécifique=sensible+chimique	$e = e_s + \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k$	$h = h_s + \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k$
totale non-chimique	$E = e_s + \frac{1}{2} u_i u_i$	$H = h_s + \frac{1}{2} u_i u_i$
totale	$e_t = e + \frac{1}{2} u_i u_i$	$h_t = h + \frac{1}{2} u_i u_i$

Table 1.2 : Variables possibles pour représenter l'énergie d'un écoulement. Quelle que soit la forme, on rappelle qu'enthalpies et énergies sont reliées par l'expression : énergie = enthalpie $-p/\rho$.

Chacune de ces variables dispose de sa propre équation de conservation [183]. L'expression du flux de chaleur pariétal peut alors prendre des formes différentes ce qui nécessite une attention particulière lorsqu'on développe, ou utilise, un modèle de paroi.

Pour compléter la présentation de ces variables thermodynamiques, on pourra préciser qu'il existe aussi une version "molaire" de ces variables, à ne pas confondre avec les variables massiques présentées ici. Certains auteurs utilisent aussi la température pour caractériser la conservation de l'énergie. Pour les fluides multi-espèces, cette forme introduit des combinaisons linéaires des variables thermodynamiques qui n'incitent pas à son utilisation. L'équation de la température est plutôt réservée aux fluides mono-espèce, pour lesquels ces termes compliqués disparaissent.

• **Commentaire général sur les variables multi-espèces**

Les variables qui ont été introduites pour exprimer la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour les fluides multi-espèces doivent respecter les contraintes suivantes :

$$\sum_k Y_k = \sum_k X_k = 1 \quad (1.11)$$

$$\sum_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (1.12)$$

$$\sum_k \rho Y_k V_{k,i} = 0 \quad (1.13)$$

$$\sum_k \chi_k = 0 \quad (1.14)$$

Les trois premières expressions correspondent à des contraintes de conservation de la masse alors que la dernière correspond à une contrainte thermodynamique. Le respect de ses contraintes est indispensable lors de la résolution numérique des équations de conservation.

1.1.1.b) Modélisation des termes de transport multi-espèces

Le point central dans la modélisation du comportement physique d'un mélange d'espèces réside dans la détermination des coefficients de transport multi-espèces. Leur évaluation est fondée sur la théorie cinétique des gaz [92] qui permet de traduire le comportement discret d'un gaz (à l'échelle des molécules) pour expliquer son comportement macroscopique (à l'échelle des particules fluides). Cependant, la théorie cinétique des gaz ne donne pas une expression explicite de ces coefficients de transport. Il faut en effet résoudre des systèmes linéaires qu'on appelle "systèmes de transport linéaires", issus d'approximations de Galerkin appliquées aux équations de Boltzmann linéarisées [80]. Bien entendu, l'objectif de cette section n'est pas de présenter la théorie ardue qui permet d'aboutir à l'expression de ces systèmes, mais plutôt d'introduire les notions essentielles à l'étude des fluides multi-espèces.

Les matrices de diffusion massique sont au coeur du problème de transport multi-espèces. Dans la littérature, on distingue trois matrices de diffusion différentes qui correspondent chacune à un niveau de description bien spécifique :

- D est appelée "matrice de diffusion". Les coefficients D_{kl} de cette matrice dépendent de la température, de la pression, et de la composition du mélange, $D_{kl} = f(T, p, Y_k)$. Il s'agit d'une matrice symétrique, par conséquent $D_{kl} = D_{lk}$. En d'autres termes, l'espèce k diffuse dans l'espèce l de la même façon que l diffuse dans l'espèce k . La conservation de la masse impose la contrainte $\sum_k Y_k D_{kl} = 0$.
- \mathcal{D}^{bin} est appelée "matrice de diffusion binaire". Contrairement à la matrice de diffusion, ses éléments $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$ ne dépendent que de la pression et de la température, $\mathcal{D}^{\text{bin}} = f(p, T)$. Par conséquent, un coefficient $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$ de la matrice de diffusion binaire aura une valeur différente de celle qu'aurait un coefficient D_{kl} impliquant les mêmes espèces k et l ($\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} \neq D_{kl}$). On notera aussi que la matrice est symétrique ce qui implique $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} = \mathcal{D}_{lk}^{\text{bin}}$.
- \mathcal{D} est appelée "matrice de diffusion dans le mélange". Il s'agit en fait d'un vecteur dont les composantes \mathcal{D}_k caractérisent la diffusion d'une espèce k dans le reste du mélange. Il sont évalués de la façon suivante :

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{l \neq k} X_l / \mathcal{D}_{lk}^{\text{bin}}} \quad (1.15)$$

A partir de la présentation de ces coefficients de diffusion, on peut introduire la définition des vitesses de diffusion, qui s'écrivent :

$$V_{k,i} = \underbrace{-\sum_l D_{kl} \frac{\partial X_l}{\partial x_i}}_{\text{effet de mélange}} - \underbrace{\sum_l D_{kl} (X_l - Y_l) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{effet du gradient de pression}} - \underbrace{\sum_l D_{kl} X_l \frac{\partial \ln T}{\partial x_i}}_{\text{effet Soret}} \quad (1.16)$$

lorsque seules les forces en volume agissant sur chacune des espèces sont négligées.

La résolution de ce système d'équations est extrêmement coûteuse pour un code de calcul, ce qui nécessite l'emploi de quelques simplifications. On néglige souvent le terme lié au gradient de pression car on considère que les variations de la pression restent faibles devant la valeur de la pression moyenne. L'effet Soret⁴, vitesse de diffusion liée à un gradient de température, est aussi négligée dans la plupart des applications ce qui est justifié dans notre cas à la vue des résultats présentés dans le chapitre 2. Il ne reste alors que la vitesse de diffusion liée aux différences spatiales de concentration des espèces.

$$V_{k,i} = - \sum_l D_{kl} \frac{\partial X_l}{\partial x_i} \quad (1.17)$$

Si le mélange est binaire⁵, les coefficients de diffusion sont remplacés par le coefficient de diffusion binaire associé aux espèces 1 et 2, $\mathcal{D}_{12}^{\text{bin}} = \mathcal{D}_{21}^{\text{bin}}$, et on retrouve une loi de Fick pour la diffusion des espèces :

$$V_{1,i} Y_1 = - \mathcal{D}_{12}^{\text{bin}} \frac{\partial Y_1}{\partial x_i} \quad (1.18)$$

Cette expression représente la solution exacte de l'équation (1.17) pour un mélange binaire. On ne peut donc pas s'en servir lorsque le mélange contient plus d'espèces. On utilise alors l'approximation de Hirschfelder et Curtiss [92] avec vitesse de correction. Comme le précise Giovangigli [80], il s'agit de la meilleure approximation au premier ordre de l'inversion exacte du système (1.17). Cette approximation fait recours à l'utilisation des coefficients de diffusion dans le mélange, \mathcal{D}_k , et consiste à remplacer l'équation (1.17) par :

$$V_{k,i}^{hc} X_k = - \mathcal{D}_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (1.19)$$

où $V_{k,i}^{hc}$ représente la vitesse de diffusion de Hirschfelder et Curtiss de l'espèce k dans la direction i . Une vitesse de correction doit néanmoins être introduite dans le modèle pour que les deux contraintes $\sum_k Y_k = 1$ et $\sum_k Y_k V_{k,i} = 0$ soient vérifiées. Cette vitesse de correction est notée V_i^{cor} , et vient s'ajouter à la vitesse de Hirschfelder et Curtiss. On peut obtenir son expression en sommant l'équation de conservation des espèces (1.2) sur toutes les espèces du mélange et en s'assurant qu'on retrouve bien l'équation de conservation de la masse (1.1) :

$$V_i^{cor} = \sum_k \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (1.20)$$

Au final, l'expression des vitesses de diffusion pour le modèle de Hirschfelder et Curtiss avec vitesse de correction est donnée par :

$$V_{k,i} = V_{k,i}^{hc} + V_i^{cor} \quad (1.21)$$

⁴Aussi appelé "vitesse de thermophorèse".

⁵Mélange composé de deux espèces.

Cette expression satisfait bien les contraintes de conservation de la masse. Il est important de préciser que cette approximation redonne bien l'expression de la loi de Fick (1.18) lorsque le mélange est binaire.

1.1.1.c) Modèle pour la cinétique chimique

Considérons un ensemble d'espèces k réagissant suivant R réactions :

$$\sum_k \nu_{k,r}^f \mathcal{M}_k \rightleftharpoons \nu_{k,r}^b \mathcal{M}_k \quad \text{pour } r = 1, R \quad (1.22)$$

où \mathcal{M}_k est le symbole chimique de l'espèce k , $\nu_{k,r}^f$ et $\nu_{k,r}^b$ sont les coefficients stoechiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction r . Le taux de réaction massique de l'espèce k produit par les R réactions s'écrit alors :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^R (\nu_{k,r}^b - \nu_{k,r}^f) Q_r \quad (1.23)$$

où Q_r est le taux d'avancement molaire de la réaction r , donné par :

$$Q_r = \gamma_M \left(K_r^f \prod_k \gamma_k^{\nu_{k,r}^f} - K_r^b \prod_k \gamma_k^{\nu_{k,r}^b} \right) \quad (1.24)$$

avec $\gamma_k = \rho Y_k / W_k$ la concentration molaire de l'espèce k . Pour les réactions avec troisième corps⁶, $\gamma_M = \sum_k \alpha_{k,r} \gamma_k$ est la concentration molaire équivalente du troisième corps M avec $\alpha_{k,r}$ l'efficacité de l'espèce k dans la réaction r . Pour les réactions sans troisième corps, $\gamma_M = 1$. K_r^f and K_r^b sont respectivement les constantes de réaction directe et inverse de la réaction r . Dans cette étude, la constante de réaction directe est estimée en utilisant un modèle de loi d'Arrhenius :

$$K_r^f = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1.25)$$

où A est la constante pré-exponentielle, β un exposant associé à la température, et E_a l'énergie d'activation. La constante de réaction inverse est obtenue à partir de la constante d'équilibre, $K_r^e = K_r^f / K_r^b$, dont une expression peut être obtenue à partir de la théorie de base sur les réactions chimiques [131].

1.1.2 Résolution numérique des équations de conservation

La simulation numérique en mécanique des fluides (on parlera de CFD, pour *Computational Fluid Dynamics* en anglais) est un outil de résolution des équations de conservation. Apparue au

⁶Réactions pour lesquelles le taux d'avancement dépend de la présence d'espèces environnantes dans le mélange. Le troisième corps peut être n'importe quelle espèce du mélange, et apparaît simultanément du côté des réactifs et des produits de la réaction.

cours des dernières décennies, grâce à l'avènement de l'informatique et en particulier du calcul scientifique à haute performance, elle constitue désormais un outil supplémentaire pour les ingénieurs et chercheurs, aux côtés de l'expérimentation et de la théorie, permettant par exemple de réduire le nombre de prototypes et d'essais nécessaires à la conception d'un nouveau produit.

Pour la conception des moteurs à propulsion solide, la CFD présente un intérêt tout particulier puisque la réalisation de bancs expérimentaux reste délicate et onéreuse. En effet, les contraintes thermodynamiques sont telles que les procédures expérimentales ne permettent pas d'obtenir des renseignements suffisamment précis sur l'activité de la turbulence et son interaction avec les parois des tuyères. Concernant l'ablation des parois, les expériences ne donnent accès qu'à des grandeurs intégrales : l'évolution temporelle de l'état de la surface n'est déterminée qu'à partir des relevés de la géométrie de la tuyère avant le tir, et après. On suppose alors une fonction d'interpolation pour traduire cette information en termes de taux de récession de surface, aussi appelé "vitesse d'ablation". Dans cette situation, la CFD apporte des données complémentaires. Cependant, avant toute exploitation, la qualité des données numériques doit être vérifiée par confrontation avec des données de référence (solutions analytiques, données expérimentales, ou simulations numériques de haute précision).

1.1.2.a) La nature turbulente des écoulements

Les écoulements rencontrés dans la nature, tout comme ceux des applications industrielles, sont généralement dans un régime turbulent [239, 185, 43]. Bien qu'il n'existe à ce jour aucune définition universelle de la turbulence, ses principales propriétés sont connues. La turbulence se traduit par la présence de mouvements tourbillonnaires répartis continûment sur une large plage d'échelles spatiaux-temporelles. Cette dynamique tourbillonnaire tridimensionnelle non-linéaire, est alors soumise à des mécanismes de transfert d'énergie entre grandes et petites structures. Cet état se distingue de l'écoulement laminaire où les seuls tourbillons ont une taille et une position bien définies.

Pour connaître la nature de l'écoulement (laminaire ou turbulent), on définit le nombre sans dimension de Reynolds qui donne un ordre de grandeur entre les forces inertielles et visqueuses qui agissent sur une particule fluide :

$$Re = \frac{U L}{\nu} = \frac{\rho U L}{\mu} \quad (1.26)$$

où U et L sont respectivement une vitesse et une longueur caractéristiques de l'écoulement. Les forces inertielles d'entraînement contribuent à la déstabilisation de l'équilibre mécanique d'une particule fluide alors que les forces visqueuses, opposées au mouvement, tendent à sa stabilisation. La limite entre régime laminaire et turbulent n'est pas fixe, car la transition entre les deux régimes dépend de nombreux paramètres. En écoulement externe, on considère souvent que le régime turbulent intervient pour un nombre de Reynolds dans la gamme $Re > 10^5$. En écoulement interne,

canal par exemple, cette limite est nettement plus basse et la turbulence de l'écoulement est observée pour $Re > 3000$. Pour les moteurs à propulsion solide, l'écoulement est généralement laminaire dans le fond avant de l'appareil et devient fortement turbulent lorsqu'on s'approche du fond arrière (zone dans laquelle se situe la tuyère). A titre d'exemple, le nombre de Reynolds atteint un ordre de $Re \approx 10^7$ dans les boosters MPS-P230 de la fusée Ariane 5.

Un principe attribué aux écoulements turbulents est celui de la cascade d'énergie [194]. Selon ce concept, les grandes échelles (ou grands tourbillons) sont instables et se détruisent en transférant leur énergie à des tourbillons de taille inférieure. Ce processus se répète de proche en proche jusqu'à ce que les tourbillons atteignent une taille caractéristique suffisamment petite pour considérer un comportement stable de ces tourbillons. A cette échelle, le nombre de Reynolds local est petit, de telle sorte que la dissipation de l'énergie cinétique s'opère par viscosité moléculaire. Cette image proposée par Richardson est d'importance car elle place la dissipation de l'énergie cinétique au coeur du processus de transfert d'énergie. Kolmogorov [127] complète cette description par plusieurs hypothèses afin d'obtenir des renseignements sur la taille des plus petits tourbillons responsables de la dissipation de l'énergie cinétique. Lorsqu'il existe une séparation distincte entre les petites et les grandes échelles de l'écoulement turbulent, étant donné un taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, ϵ , et une viscosité cinématique moléculaire, ν , les échelles de Kolmogorov de longueur, de vitesse, et de temps s'écrivent respectivement :

$$l_k = (\nu^3/\epsilon)^{1/4} \quad (1.27)$$

$$u_k = (\epsilon\nu)^{1/4} \quad (1.28)$$

$$\tau_k = (\nu/\epsilon)^{1/2} \quad (1.29)$$

Il s'agit des grandeurs caractéristiques définissant les plus petits tourbillons dissipatifs. Le nombre de Reynolds basé sur les échelles de Kolmogorov est unitaire, $l_k u_k / \nu = 1$, ce qui est consistant avec le principe de la cascade énergétique selon laquelle seule la dissipation moléculaire agit sur les petites structures. En supposant que le taux de dissipation soit de l'ordre de $\epsilon \sim u_0^3/l_0$, avec u_0 et l_0 les échelles de vitesse et de longueur des plus gros tourbillons, on trouve les relations suivantes :

$$l_k/l_0 \sim Re^{-3/4} \quad (1.30)$$

$$u_k/u_0 \sim Re^{-1/4} \quad (1.31)$$

$$\tau_k/\tau_0 \sim Re^{-1/2} \quad (1.32)$$

Ces relations donnent une expression des rapports entre échelles de Kolmogorov et échelles intégrales. Elles présentent un intérêt pratique lorsqu'on cherche à déterminer la taille des plus petits tourbillons dans des configurations simples, par exemple lorsqu'on met en place une simulation numérique directe.

Une représentation classique du processus de cascade énergétique consiste à tracer le spectre d'énergie cinétique turbulente, $E = 1/2 (u'_d)^2$, en fonction du nombre d'onde, $k = 2\pi/d$ (dans

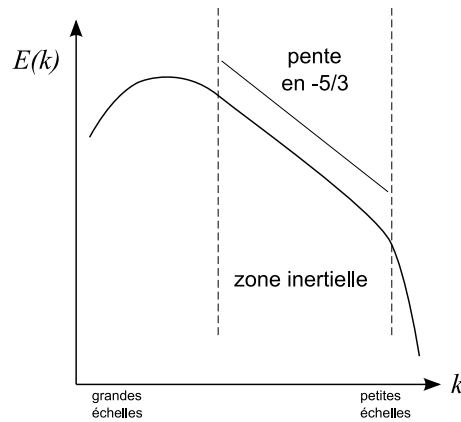


Figure 1.1 : Spectre d'énergie cinétique turbulente (représentation logarithmique).

cette notation, u'_d représente une vitesse fluctuante caractéristique associée à une échelle de taille d). L'exemple typique de ce spectre, en "forme de mammouth", est présenté sur la figure 1.1. On y distingue trois zones. La première est celle des grandes échelles, dans laquelle les structures de la turbulence sont porteuses de l'énergie du mouvement moyen. Ces structures sont généralement anisotropes, et leur taille bornée par les conditions aux limites du système considéré. A l'opposé du spectre, les petites échelles sont celles qui contiennent le moins d'énergie et qui dissipent l'énergie cinétique par viscosité moléculaire. Ces petites structures sont isotropes et leur taille est bornée selon les échelles de Kolmogorov décrites précédemment. Enfin, entre ces deux régions du spectre apparaît la zone inertielle. Dans cette zone, la dissipation et la production de l'énergie cinétique sont en équilibre, le transfert d'énergie s'effectuant selon une variation en $k^{-5/3}$. Cette région inertielle est d'autant plus grande que le nombre de Reynolds est élevé. Cette représentation spectrale de la turbulence nous permettra pas la suite d'introduire les différentes approches pour la simulation numérique des écoulements turbulents.

Dans le contexte des écoulements pariétaux, il est important de préciser que la turbulence participe à l'augmentation des transferts pariétaux. Cela peut être souhaitable lorsqu'on cherche à refroidir une paroi, et fortement indésirable dans le cas où un fluide chaud s'écoule sur celle-ci. C'est là tout le problème rencontré dans les tuyères car l'écoulement y est turbulent (condition presque obligatoire en pratique pour que la poussée de l'appareil soit suffisante), et car le niveau de température, de l'ordre de $3000K$, impose une contrainte thermique considérable sur la structure de l'appareil.

1.1.2.b) Les différentes approches pour la simulation numérique

Il existe plusieurs façons d'étudier les écoulements turbulents. La première, la plus naturelle, est expérimentale. Cette approche de mesure et d'observation a longtemps été la seule à permettre

l'étude de la mécanique des fluides dans des configurations complexes. L'approche analytique permet également d'étudier le comportement d'un écoulement, mais elle est limitée à des configurations simples pour lesquelles des simplifications des équations de Navier-Stokes sont possibles (par exemple, un écoulement laminaire, bi-dimensionnel, développé dans une certaine direction). Dans un cas quelconque, la résolution des équations de Navier-Stokes passe nécessairement par l'emploi de méthodes numériques qui consistent à discrétiser les équations de conservation spatio-temporellement. Le choix de la méthode numérique dépend essentiellement de la nature physique des écoulements étudiés, de l'objectif de l'étude envisagée, ainsi que des ressources informatiques disponibles.

On recense ainsi trois approches différentes, dont une représentation schématique est proposée sur la figure 1.2 :

- DNS (*Direct Numerical Simulation*, "Simulation Numérique Directe" en français) : une approche déterministe dans laquelle les équations de Navier-Stokes sont résolues à partir d'un jeu de solution initiale et de conditions aux limites. Dans ce type de simulation, l'intégralité du spectre des phénomènes physiques à représenter est résolue. Cela signifie que la plus petite échelle de la turbulence est résolue sur le maillage, tout comme les zones de réaction chimique pour les fluides multi-espèces. Aucun modèle n'est donc utilisé mais les puissances de calcul actuelles limitent cette approche aux configurations académiques. La DNS sert donc principalement à la compréhension physique de mécanismes complexes, et à la validation de modèles développés pour les approches RANS ou LES.
- RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) : les équations résolues dans ces simulations sont obtenues en moyennant statistiquement les équations de Navier-Stokes. Ainsi, seul le spectre de l'écoulement moyen est résolu alors que les structures turbulentes sont toutes modélisées. Cette modélisation consiste à fermer les termes qui apparaissent dans les équations de Navier-Stokes moyennes. L'approche RANS permet d'utiliser des maillages relativement grossiers et ainsi d'avoir des temps de restitution courts. Cet avantage en fait le candidat principal pour les simulations numériques de type industriel. Le principal inconvénient de ces méthodes est la complexité et la prédictivité des modèles employés : les modèles de fermeture ne conservent leur fiabilité que si l'écoulement simulé reste dans le cadre des hypothèses qui ont servi à son développement. Initialement développée pour des problèmes statistiquement stationnaires, cette méthode a été étendue aux écoulements dont les statistiques dépendent du temps. On parlera alors de méthodes U-RANS, pour *Unsteady-Reynolds-Averaged Navier-Stokes*.
- LES (*Large-Eddy Simulation*, "Simulation aux Grandes Echelles" en français) : cette méthode est intermédiaire entre l'approche DNS et RANS en termes de quantité d'informations résolues. Elle consiste à filtrer spatialement les équations de Navier-Stokes pour ne simuler que les grandes structures de l'écoulement. La séparation entre les grandes et les petites

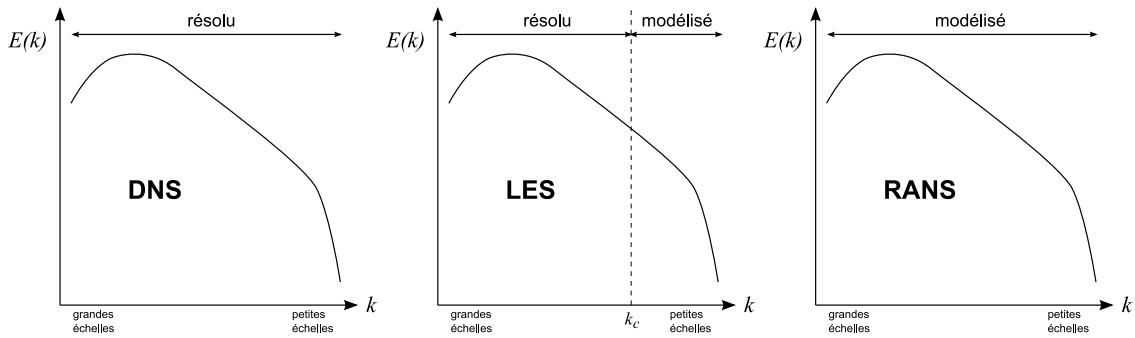


Figure 1.2 : Comparaison des différentes approches pour la simulation numérique de la turbulence. L'exemple du spectre d'énergie cinétique turbulente permet de dissocier schématiquement les échelles résolues par la méthode numérique, de celles modélisées.

structures se fait par un filtre passe-bas de taille caractéristique Δ . Cette opération définit un nombre d'onde de coupure, $k_c = \pi/\Delta$, qui délimite dans l'espace spectrale les échelles résolues de celles modélisées. Les simulations LES ne résolvent donc pas un champ moyen comme le RANS, mais un champ instantané filtré. Les termes non-fermés des équations de Navier-Stokes filtrées sont dits de "sous-maille", et ils représentent l'effet des petites structures non-résolues sur les grandes structures résolues. Le coût de ces simulations est plus élevé que le coût des calculs RANS, car elles apportent beaucoup plus d'informations. Ce coût reste néanmoins beaucoup plus faible que celui de la DNS. Un autre avantage de la LES est que les petites structures modélisées sont en général indépendantes des grandes structures. Elles sont quasiment universelles ce qui simplifie l'écriture des modèles de sous-maille pour la LES. Si le modèle de sous-maille est bien construit, les calculs LES tendent vers la DNS lorsqu'on diminue la taille caractéristique du maillage. C'est un gros avantage par rapport aux simulations RANS qui ne peuvent représenter que l'écoulement moyen, quelle que soit la résolution du maillage. Pour une présentation approfondie des méthodes LES, on pourra se reporter aux ouvrages de Sagaut [199] ou Lesieur *et al.* [138].

La figure 1.2 illustre les différences entre les décompositions spectrales propres au RANS et à la LES. Cette figure montre clairement que la quantité d'énergie à modéliser dans les simulations RANS est nettement supérieure à celle des LES. Le spectre modélisé est directement lié à la viscosité turbulente de Boussinesq, généralement utilisée dans les simulations RANS et LES. Plus l'énergie des échelles modélisées est grande et plus la viscosité turbulente est importante. Cette viscosité ayant un rôle diffusif important dans les simulations, les méthodes numériques employées en RANS et en LES sont différentes. En LES, le schéma convectif ne doit pas introduire trop de dissipation numérique, qui risque de masquer la viscosité turbulente et de nuire à la prédictivité du calcul. En RANS, la viscosité turbulente du modèle étant beaucoup plus importante, la dissipation numérique des schémas numériques peut être plus grande de manière à

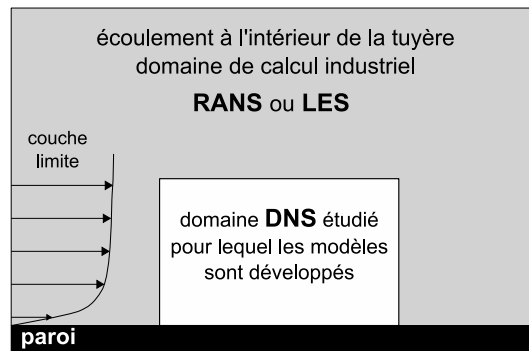


Figure 1.3 : Positionnement des calculs réalisés dans cette étude par rapport à un calcul de tuyère industriel.

augmenter la robustesse du code. Dans le cas des DNS, bien qu'il n'y ait pas de problème de modélisation de la turbulence, on peut tout de même recenser un certain nombre de sources d'erreur. Il s'agit exclusivement d'erreurs liées à la méthode numérique retenue, comme les propriétés de dissipation et dispersion du schéma numérique, les erreurs liées aux conditions aux limites, ou encore les erreurs d'*aliasing* [130] (erreur qui apparaît quand deux fonctions sont multipliées entre-elles dans un espace discret, *e.g.* sur les termes non-linéaires). L'utilisation efficace d'une approche de type DNS ne peut se faire qu'en maîtrisant l'ensemble de ses paramètres numériques.

Dans cette étude, la méthode DNS a été utilisée afin de générer des données de couche limite turbulente représentatives des écoulements qu'on rencontre dans les tuyères des moteurs à propulsion solide. On se sert ensuite de cette base de données pour observer le comportement statistique de l'écoulement sous l'influence de plusieurs paramètres, et fournir des modèles de paroi utilisables dans des codes de calcul de type RANS ou LES (voir la figure 1.3).

1.1.2.c) Présentation du code de calcul AVBP

Pour la simulation numérique directe des écoulements pariétaux présentés dans ce manuscrit, nous avons utilisé le code AVBP [206]. Ce code a été écrit à l'origine par l'OUCL (Oxford University Computing Laboratory) et le CERFACS. Il est désormais la propriété du CERFACS et de l'Institut Français du Pétrole (IFP) qui le maintiennent conjointement. D'autres groupes comme l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) ou l'Ecole Centrale de Paris participent aussi à son développement. La conception d'AVBP repose sur l'idée de construire une librairie de routines pour obtenir un environnement modulaire, et faciliter le développement et le codage de nouveaux modèles physiques. Il a été écrit dès le départ en vue d'une utilisation sur des calculateurs parallèles (librairies COUPL à l'origine, remplacé depuis par MPL) ce qui explique ses performances actuelles sur les supers-calculateurs.

Il s'agit d'un code de calcul dédié à la simulation numérique des écoulements réactifs en géométrie complexe [204], principalement pour des applications de type combustion, mais la polyvalence de

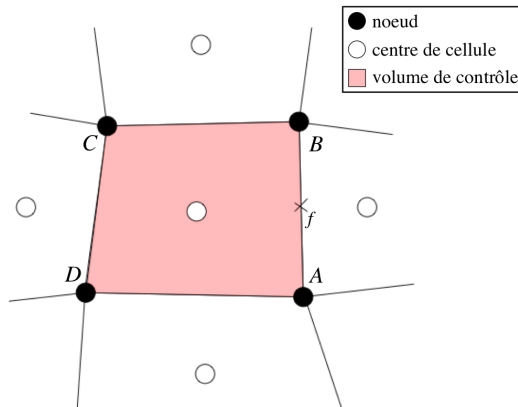


Figure 1.4 : Représentation bi-dimensionnelle du maillage utilisé avec la méthode cell-vertex. Le volume de contrôle est délimité par les noeuds du maillage. Les flux, f , sont intégrés le long des arêtes (sur les faces en 3D) délimitées par les noeuds de calcul. Cette figure est une reproduction issue de la thèse de Lamarque [132].

ce code lui permet de traiter également des configurations plus académiques comme les écoulements pariétaux, ou les plaques multi-perforées [151]. Ces caractéristiques, ainsi que la multitude des configurations sur lesquelles le code a été validé, font d'AVBP le candidat idéal pour mener à bien les DNS envisagées dans ce travail.

Le code de calcul résout donc les équations de Navier-Stokes pour des écoulements compressibles, multi-espèces, et réactifs présentées dans la section 1.1.1.a). Les méthodes numériques disponibles permettent d'utiliser des grilles de calcul structurées, non-structurées, ou hybrides, avec des schémas volumes finis ou éléments finis. La formulation retenue dans AVBP est de type *cell-vertex* (traduite par "cellules et sommets") qui consiste à stocker les variables aux noeuds du maillage, le volume de contrôle étant délimité par les cellules de maillage primal (voir la figure 1.4). En d'autres termes, les noeuds du maillage ne représentent pas le centre des volumes de contrôle comme dans le cas des formulations *cell-centered* ou *vertex-centered*. L'avantage de la méthode *cell-vertex* réside dans son affinité avec les éléments finis ce qui permet de développer de façon souple des schémas aussi bien volumes finis qu'éléments finis. De plus, cette méthode est plus robuste aux distorsions de maillage.

On retrouve ainsi toute une gamme de schémas numériques dans le code AVBP :

- *schéma Lax-Wendroff* (LW) : schéma Lax-Wendroff [135, 136, 91] adapté à la méthode *cell-vertex*. Il s'agit d'un schéma centré d'ordre 2 en espace et en temps. Ce second ordre est atteint avec une seule étape d'avancement temporel ce qui rend la méthode relativement précise pour un nombre minimal d'opérations de calcul. Ses caractéristiques en termes de dissipation et de dispersion sont moyennes mais son faible coût de calcul en fait un outil idéal pour des calculs préliminaires, ou pour faire "converger" rapidement une simulation

avant d'utiliser des schémas numériques d'ordre plus élevé.

- *schémas Taylor-Galerkin à deux étapes* (TTG) : famille de schémas éléments finis Taylor-Galerkin à deux étapes (appelés TTG pour *Two-step Taylor Galerkin*). Ce sont des schémas de type prédicteur-correcteur. Dans AVBP, le schéma TTGC [52] d'ordre 3 en espace et en temps, est souvent utilisé car il présente de très bonnes propriétés en termes de dissipation (il dissipe peu les petites longueurs d'onde associées aux petites structures de l'écoulement). Son surcoût en temps de calcul est d'un facteur 2.3 par rapport au schéma Lax-Wendroff.
- *schéma Galerkin Runge-Kutta* (GRK) : schéma éléments finis plus précis en espace que le schéma TTGC puisqu'il est d'ordre 4. Son avancement temporel se fait avec une méthode Runge-Kutta à trois étapes, d'ordre 3 en temps. Ce schéma numérique est généralement moins utilisé que le schéma TTGC car il convient essentiellement aux configurations pour lesquelles le maillage est structuré et régulier, et car son utilisation est un peu plus coûteuse (son surcoût est d'un facteur 2.5 par rapport au schéma Lax-Wendroff).

Dans ce travail, nous avons exclusivement utilisé les schémas Lax-Wendroff, et Galerkin Runge-Kutta. Pour les calculs d'ordre élevé, le schéma GRK a été préféré au schéma TTGC car le domaine de calcul utilisé (boîte parallélépipédique) se prête bien à une discrétisation structurée et régulière du domaine. De plus le schéma GRK ne présente pas le problème de fermeture du terme de bord⁷ qui apparaît avec la formulation *cell-vertex* du schéma TTGC [133].

Dans AVBP, l'emploi de ces schémas de convection, peu dissipatifs car centrés en espace, s'accompagne de l'utilisation d'opérateurs de diffusion artificielle. En effet, ces schémas ont des difficultés à transporter les forts gradients, même dans le cas d'une DNS, et sont sujets au phénomène de Gibbs (oscillations numériques ou *wiggles* qui apparaissent au niveau des discontinuités). Malheureusement, l'opérateur de diffusion n'est généralement pas suffisant pour dissiper ces perturbations numériques, et le recours à des méthodes de stabilisation devient nécessaire. Dans les simulations de cette étude, de la viscosité artificielle du quatrième ordre a été utilisée pour prévenir toute apparition d'ondes numériques néfastes à la qualité des résultats. Il s'agit d'un opérateur d'hyperdiffusion artificielle dont le rôle est de supprimer les oscillations noeud à noeud non amorties. Les éventuels problèmes numériques sont détectés par un senseur défini spécifiquement pour les écoulements turbulents instationnaires. Le montant d'hyperviscosité artificielle appliquée dépend de la valeur prise par ce senseur, ainsi que d'une constante définie par l'utilisateur. Elle est alors appliquée dans l'ensemble du domaine, sur les équations de conservation des espèces et de l'énergie, mais pas sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour ne pas perturber la dynamique de l'écoulement. Pour les DNS de cette étude, les mesures révèlent une activité complètement négligeable de la viscosité artificielle, comparativement aux autres termes diffusifs. En effet, la trace des termes artificiels n'apparaît pas dans les bilans de conservation, ce qui garantit la qualité des résultats présentés par la suite.

⁷Ce problème intervient dans les schémas à discrétisation totale, *i.e.* quand les dérivées temporelles de l'équation d'Euler discrétisée sont remplacées par des dérivées spatiales. C'est le cas des schémas Lax-Wendroff et TTGC.

En ce qui concerne les conditions aux limites, cette étude n’emploie que des conditions simples du type “condition périodique”, ou “condition de paroi isotherme”. Pour la première, on stipule au code de respecter la continuité des flux aux interfaces deux-à-deux périodiques. Pour la seconde, on impose une vitesse nulle et une température de paroi par une méthode de type Dirichlet, tout en s’assurant qu’aucun flux normal ne rentre dans le domaine. Des conditions plus complexes pour décrire l’ablation des parois dans une approche DNS ont aussi été développées et utilisées. Elles seront présentées dans le chapitre consacré à l’étude de ce phénomène physique (chapitre 6).

Précisions concernant la fermeture des équations dans le code AVBP

Voici quelques précisions importantes qui permettent de comprendre la position du code AVBP par rapport aux équations formulées précédemment (sections 1.1.1.a) à 1.1.1.c) :

- Parmi les différents choix possibles, le code AVBP transporte l’énergie totale non-chimique pour exprimer la conservation de l’énergie. L’équation transportée est donc différente de l’équation (1.4) présentée auparavant.
- Pour fermer le problème de transport multi-espèces, le code néglige l’effet Soret et le terme de transport par gradient de pression. On utilise l’approximation de Hirschfelder et Curtiss avec vitesse de correction, et les coefficients de diffusion des espèces dans le mélange, \mathcal{D}_k , sont estimés en supposant que le nombre de Schmidt de chaque espèce, Sc_k , est constant en espace et en temps (quelles que soient la pression et la température). Cette approximation semble forte sur le papier, mais se vérifie assez bien en pratique. Elle est utilisée dans la plupart des codes de calcul multi-espèces. Les coefficients de diffusion sont donc donnés par la relation, $\mathcal{D}_k = \nu / Sc_k$.
- En ce qui concerne la diffusion thermique, on suppose que le nombre de Prandtl du mélange est constant en espace et en temps. En réalité, le nombre de Prandtl d’un mélange évolue en fonction de sa composition locale et de son état thermodynamique (température et pression). Cependant, tout comme l’approximation “nombre de Schmidt” constant, cette hypothèse est souvent vérifiée, ce qui justifie son utilisation. Le coefficient de diffusion thermique du mélange est alors déterminé par la relation $\lambda = \mu C_p / Pr$.
- La viscosité dynamique du mélange est fonction de la température (loi en puissance).
- Les enthalpies de chaque espèce sont stockées dans une table par pas de $100K$. Les capacités calorifiques massiques à pression constante sont évaluées par dérivation de l’enthalpie par rapport à ces tables, ce qui leur impose une valeur constante par tranche de $100K$.
- Le terme source radiatif n’est pas calculé dans le code. Cependant, il est possible de coupler AVBP avec un code de transferts radiatifs capable d’évaluer ce terme (avec le code PRISSMA par exemple, développé sur la base du code DOMASIUM [107]).
- La viscosité en volume est négligée car les écoulements simulés peuvent être considérés comme isovolumes (la divergence de la vitesse est nulle). Il s’agit de la seule justification possible car une estimation du rapport des viscosités η / μ avec la librairie EGLIB [72] montre que $20 < \eta / \mu < 30$ pour les mélanges et les conditions thermodynamiques étudiées.
- L’effet Dufour est négligé. Cette approximation sera justifiée par la suite.

Pour tout renseignement complémentaire concernant le code de calcul, que ce soit pour les méthodes numériques, les conditions aux limites, ou l'utilisation de la viscosité artificielle, le lecteur est vivement invité à consulter le manuel du code AVBP [39], et surtout la thèse de Lamarque [132] dans laquelle sont notamment présentés les propriétés et les domaines de stabilité des schémas numériques précités.

1.2 Couche limite turbulente : description

Dans cette section, on présente les caractéristiques générales des écoulements pariétaux turbulents. Dans un premier temps, la présentation est orientée sur la description des structures cohérentes qu'on retrouve dans les couches limites simples, sur lesquelles seule la turbulence a une influence. On présente ensuite la couche limite d'un point de vue macroscopique, en distinguant plusieurs régions qui ont leurs propres échelles caractéristiques, et dans lesquelles on peut recenser des mécanismes de transport distincts. Finalement, le lien entre ces écoulements de référence et les écoulements complexes à l'intérieur des tuyères est succinctement introduit dans la dernière section.

1.2.1 Présentation générale

L'étude des écoulements pariétaux a toujours été au centre du domaine de la mécanique des fluides. Les premières études s'intéressant en détail à ce phénomène sont généralement attribuées à Prandtl [186]. Son examen des écoulements de proche paroi l'a en effet conduit à négliger les termes inertiels près d'un mur, pour analyser le mouvement des fluides dans ce qu'il nomma alors la "couche de transition". Cette approximation est désormais courante pour faciliter la compréhension, et la modélisation, des écoulements pariétaux. Depuis, de nombreux scientifiques ce sont intéressés à cette problématique (Blasius [21], von Kármán [247, 248], Clauser [49], pour en citer quelques uns), et le terme "couche limite" est désormais employé dans l'ensemble de la communauté. Il existe de nombreux ouvrages spécifiques à ce sujet (Schlichting [203], Cousteix [53], Kays *et al.* [8]). La plupart des livres théoriques sur la turbulence contiennent également une section propre aux écoulements de couche limite (Tennekes & Lumley [239], Lesieur [137], Chassaing [43], Pope [185]) car l'interaction entre un fluide et une paroi mène à une déstabilisation de l'écoulement, source de turbulence si le nombre de Reynolds est suffisamment élevé.

Un écoulement de couche limite est issu d'un équilibre entre convection et diffusion. La figure 1.5 illustre ce principe en prenant l'exemple d'un écoulement sur plaque plane. Le processus convectif est associé à la vitesse U_∞ à laquelle l'écoulement arrive sur la plaque de longueur L . La couche limite se développe alors sur la plaque car le cisaillement de l'écoulement se propage dans l'ensemble de la couche limite par diffusion moléculaire et turbulente. Le profil de vitesse, u ,

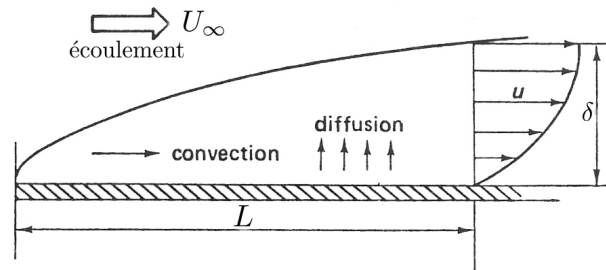


Figure 1.5 : Diffusion et convection dans une couche limite sur plaque plane.

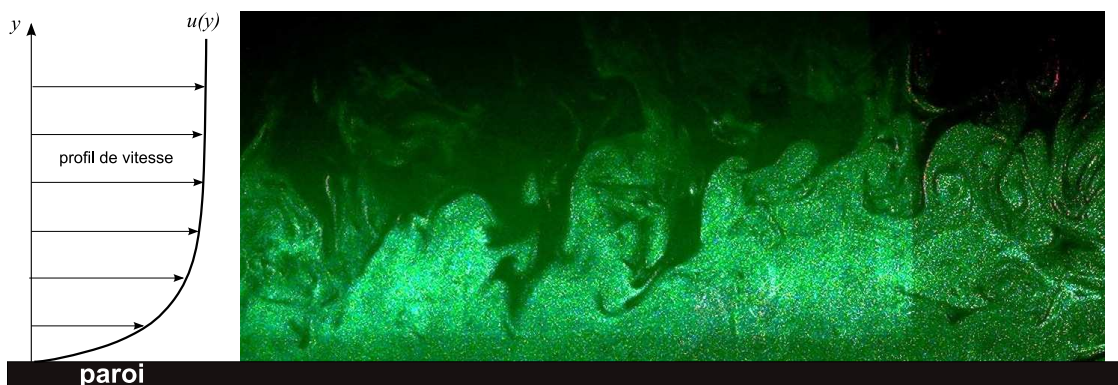


Figure 1.6 : Visualisation expérimentale d'une couche limite turbulente par méthode PIV (Particle Image Velocimetry). Image produite par le laboratoire Saint Anthony Falls Laboratory.

est borné par une vitesse nulle à la paroi (imposée par adhérence), et par la vitesse U_∞ de l'écoulement principal. La couche limite caractérise alors le domaine d'épaisseur δ qui sépare la paroi de l'écoulement principal. En régime turbulent, les termes non-linéaires des équations de conservation déstabilisent l'écoulement et des structures turbulentes apparaissent dans la couche limite (figure 1.6). L'enjeu réside alors dans la détermination statistique de ces structures : forme et organisation, classification de la population des tourbillons, orientation des structures, comportement moyen et agitation turbulente de l'écoulement, ou encore mécanismes et lieu de la production de turbulence.

Les premières études qui ont permis de répondre à ces questions sont expérimentales. Diverses méthodes ont été utilisées, comme l'ensemencement de l'écoulement par de la fumée, ou un brouillard de bulles d'hydrogène [125, 141] ou de gouttes d'huile [74] injectées dans la couche limite par des rangées de trous microscopiques. De nos jours, les expérimentateurs préfèrent utiliser des mesures par fil chaud [160, 157] ou des méthodes PIV (Particule Image Velocimetry) [140, 3, 38, 89, 229]. Ces études ont notamment permis de mettre en évidence l'existence de structures tourbillonnaires caractéristiques.

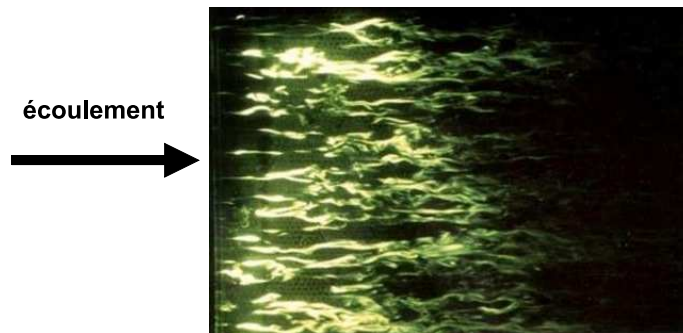


Figure 1.7 : Visualisation des “streaks” : écoulement à très basse vitesse formant des structures cohérentes étirées le long de la paroi. Visualisation par méthode LIF (Laser-Induced Fluorescence), réalisée par Gal-el-Hak [www.efluids.com/efluids/gallery/].

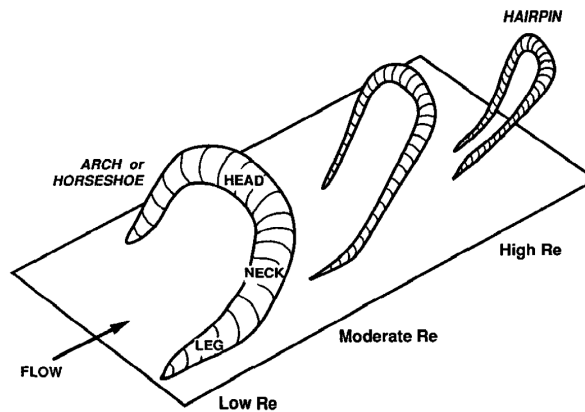


Figure 1.8 : Schéma des structures en épingle à cheveux, “hairpin”, et fer à cheval, “horseshoe”. Représentation proposée par Robinson [196].

Robinson [196] synthétise ces résultats et propose la classification, et la désignation des structures cohérentes suivantes :

- Les “streaks” : structure à basse vitesse allongée sur la paroi, en forme de filet (figure 1.7).
- Les structures tourbillonnaires formant une arche dont la base est reliée à la paroi. Quand le nombre de Reynolds est faible, ces structures sont dites en fer à cheval (“horseshoe”). On parlera de structures en épingle à cheveux (“hairpin”) lorsque le nombre de Reynolds est élevé car elle deviennent moins volumineuses (figure 1.8).
- Le phénomène “d’éjection” caractérise les poches de fluide à basse vitesse, qui sont éjectées de la paroi vers l’extérieur de la couche limite.
- Les “sweeps” : poches de fluide à haute vitesse, provenant de l’extérieur de la couche limite et dirigées vers la paroi.

On trouve souvent l'utilisation du mot "bursting" pour désigner des structures cohérentes responsables de la production de turbulence. Cependant, comme l'indique Robinson [196], l'utilisation de ce mot reste floue dans la littérature. En effet, le phénomène de "bursting" fait référence à un ensemble de structures interagissant entre elles, plutôt qu'à une structure en particulier.

Depuis le milieu des années 1980, les chercheurs se sont aussi intéressés à la réalisation numérique des écoulements pariétaux observés en laboratoire. L'étude majeure de référence à ce sujet est due au trio Kim, Moin et Moser [123] qui pour la première fois a réalisé une simulation numérique direct d'écoulement en canal périodique. Cette configuration de calcul a permis de retrouver l'essentiel des structures observées dans les expériences, ainsi que le comportement moyen et les statistiques du premier et du second ordre de l'écoulement. Ce travail constitue une avancée d'importance pour la mécanique des fluides, ouvrant la porte sur la génération numérique de données pariétales pertinentes. L'intérêt des méthodes numériques est double : 1) les "mesures numériques" ne sont pas intrusives vis à vis de l'écoulement ; 2) la solution numérique donne accès à l'ensemble des variables décrivant l'écoulement, dans tout le domaine de simulation (ceci peut faciliter la détection et le suivi de structures cohérentes, en utilisant par exemple les critères Q , λ_2 , Δ , ou λ_{ci} [40]). Ce deuxième point facilite l'étude des écoulements complexes pour lesquels l'instrumentation de la configuration est délicate voire impossible (c'est notamment le cas dans les moteurs à propulsion solide). De même, l'analyse numérique d'un écoulement renseigne sur l'évolution spatio-temporelle de variables difficilement mesurables, comme les fractions massiques, ou les taux de dégagement de chaleur des réactions chimiques, ce qui présente un avantage indéniable pour l'étude des écoulements multi-espèces.

Ainsi, des études par simulations numériques directes de plus en plus fines sont venues compléter les bases de données décrivant les couches limites turbulentes. Les chercheurs ont suivi la progression constante des moyens de calculs pour réaliser des simulations à nombre de Reynolds de plus en plus élevé : en 1987, Kim Moin et Moser [123] proposaient une étude à $Re_\tau = 180$ (nombre de Reynolds basé sur la demi-hauteur du canal, et la vitesse de friction, $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho_w}$) ; en 1999, Moser *et al.* [161] présentaient une étude à $Re_\tau = 590$; en 2006, Hoyas & Jiménez [95] réalisaient une DNS à $Re_\tau = 2000$ ce qui constitue à ce jour le calcul numérique de référence pour les écoulements de canal plan.

La configuration de canal périodique est maintenant répandue car la mise en place d'un tel calcul est relativement aisée (domaine de calcul et conditions aux limites simples). Cependant, cette configuration reste particulière car elle caractérise un écoulement interne, développé dans la direction de l'écoulement. D'autres auteurs, plutôt intéressés par les écoulements externes et les couches limites qui se développent dans la direction de l'écoulement (profils d'aile par exemple), ont mis en place des méthodes de calcul spécifiques pour la simulation des couches limites turbulentes sur plaque plane. Ces travaux ont été initiés par Spalart [221] et complétés ensuite par Rai & Moin [189], ou encore Kong *et al.* [128]. Dans un travail récent, Wu & Moin [257] ont présenté les résultats d'une simulation de couche limite turbulente sur plaque plane d'une finesse

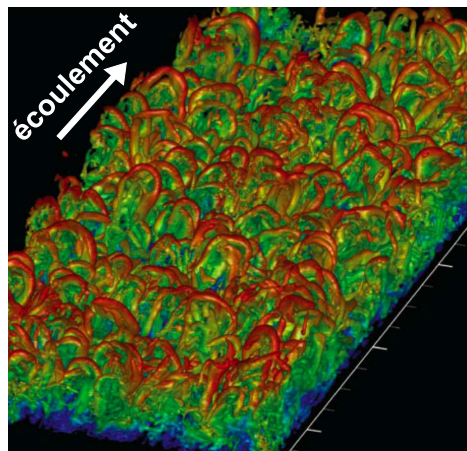


Figure 1.9 : Ecoulement turbulent sur plaque plane. Iso-surfaces du critère Q colorées par la vitesse longitudinale. Résultats obtenus par Wu & Moin [257].

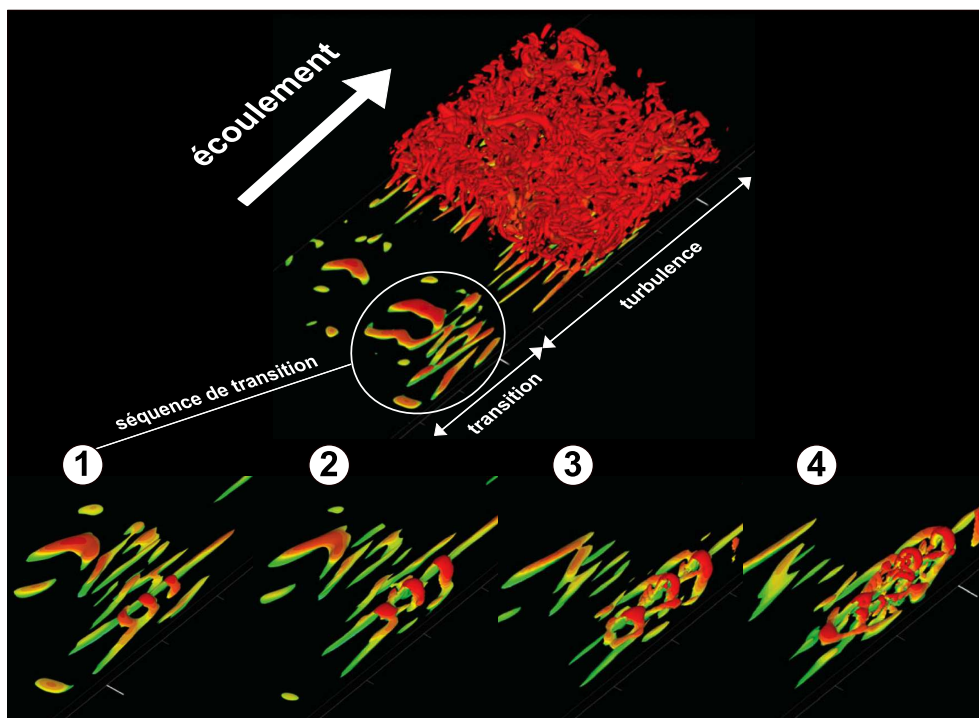


Figure 1.10 : Séquence de transition vers la turbulence d'une couche limite sur plaque plane : apparition d'une structure Λ , sur laquelle se développent des structures en "épingle à cheveux" (1). Ces structures sont alors convectées (2), étirées, et éjectées vers l'écoulement principal. De nouvelles structures apparaissent (3), s'enroulent et forment un "spot" de turbulence (4). Représentation par iso-surfaces du critère Q colorées par la vitesse longitudinale, obtenue par Wu & Moin [257].

remarquable. Leurs résultats indiquent la présence d'une population dense de structures en "fer à cheval" près de la paroi (figure 1.9). La détection des structures cohérentes leur a aussi permis de mettre en évidence le processus de transition de la couche limite vers un état turbulent (figure 1.10) : une paire de tourbillons longitudinaux en "forme de Λ " apparaît le long de la paroi dans la zone de transition, suivi de la formation de structures en "épingle à cheveux", qui s'étirent et sont éjectées dans l'écoulement principal sous forme d'un "spot" de turbulence primaire convecté par la suite dans la couche limite. La turbulence est entretenue par ce mécanisme.

Les expérimentateurs et les numériciens, disposent ainsi d'outils fiables pour l'étude des écoulements pariétaux. Une liste non-exhaustive de ces travaux fondamentaux est proposée dans la table 1.3, où figurent uniquement les études portant sur des écoulements simples de référence : paroi plane, lisse, nombre de Mach faible, sans transfert de chaleur significatif. On y distingue notamment les travaux expérimentaux de Zhou *et al.* [259], Adrian *et al.* [3], et Marusic [147] qui ont mis en évidence l'existence de super-structures cohérentes de grande échelle, circulant sous forme de trains de vortex corrélés en espace. Ces structures laissent alors leur signature sur le spectre d'énergie cinétique. Ce phénomène semble intervenir à haut nombre de Reynolds, et n'a encore jamais été observé dans les simulations numériques directes pour lesquelles le nombre de Reynolds reste limité.

On remarquera aussi l'étude de Jiménez *et al.* [103], qui compare une simulation numérique de canal périodique avec une simulation de couche limite turbulente externe sur plaque plane. Il s'avère que la production de la turbulence est nettement supérieure dans une couche limite sur plaque plane. Cette constatation est due à l'interaction de l'extérieur de la couche limite avec un écoulement potentiel, non présent dans le cas des écoulements en conduite. Ainsi des paquets d'écoulement irrotationnel pénètrent dans la couche limite, accentuant les gradients de vitesse et la production d'énergie cinétique turbulente.

On distinguera enfin l'étude originale de Monty & Chong [157] qui proposent une comparaison entre une simulation numérique et une expérience d'écoulement en canal plan, à même nombre de Reynolds ($Re_\tau = 930$). Les statistiques du premier et deuxième ordre concordent parfaitement, mais une légère différence apparaît sur le spectre d'énergie cinétique. Cette différence minime est due à des structures turbulentes non capturées par la DNS car le domaine de simulation est trop court dans la direction de l'écoulement. Les auteurs proposent donc d'augmenter les dimensions du domaine de calcul.

Références	Type d'étude		Variables étudiées		
	e/î	expérimentale	numérique	vitesse	énergie
Kline <i>et al.</i> [125]	e	●	-	●	-
Falco [74]	e	●	-	●	-
Rajagopalan & Antonia [190]	e	●	-	●	-
Subramanian & Antonia [233]	e	●	-	●	●
Perry & Chong [176]	e	●	-	●	●
Moin & Kim [153]	î	-	●	●	-
Lu & Smith [141]	e	●	-	●	-
Kim, Moin & Moser [123]	î	-	●	●	-
Spalart [221]	e	-	●	●	-
Robinson [196]	i/e	●	●	●	-
Liu <i>et al.</i> [140]	e	●	-	●	-
Rai & Moin [189]	e	-	●	●	-
Honkan & Andreopoulos [93]	e	●	-	●	-
Chong <i>et al.</i> [47]	î	-	●	●	-
Moser <i>et al.</i> [161]	î	-	●	●	-
Zhou <i>et al.</i> [259]	î	-	●	●	-
Adrian <i>et al.</i> [3]	e	●	-	●	-
Wosnik <i>et al.</i> [256]	i/e	●	-	●	-
Kong <i>et al.</i> [128]	e	-	●	●	●
Marusic [147]	e	●	-	●	-
Morrison <i>et al.</i> [160]	î	●	-	●	-
Alamo <i>et al.</i> [63, 64]	î	-	●	●	-
Jiménez <i>et al.</i> [104]	î	-	●	●	-
Carlier & Stanislas [38]	e	●	-	●	-
Wei <i>et al.</i> [252]	i/e	●	-	●	-
Hoyas & Jiménez [95]	î	-	●	●	-
Jiménez & Moser [106]	î	-	●	●	-
Adrian [2]	e	●	-	●	-
Stanislas <i>et al.</i> [229]	e	●	-	●	-
Herpin <i>et al.</i> [89]	e	●	-	●	-
Monty & Chong [157]	î	●	●	●	-
Wu & Moin [257]	e	-	●	●	-
Jiménez <i>et al.</i> [103]	i/e	-	●	●	-

Table 1.3 : Liste non exhaustive des principaux travaux sur l'analyse de la structure des écoulements pariétaux de référence (simple effet de la turbulence). Travaux classés suivant le type de couche limite étudiée (e/î : écoulement externe ou interne), l'approche retenue pour générer les données analysées (expérimentale ou numérique), et les variables étudiées.

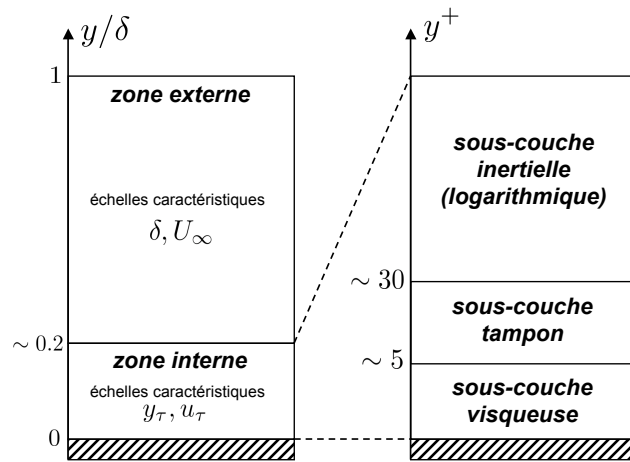


Figure 1.11 : Les différentes régions d'une couche limite turbulente.

1.2.2 Distinction des différentes régions caractéristiques

D'un point de vue macroscopique, on peut différencier plusieurs régions caractéristiques dans une couche limite. Une représentation de ces différentes régions est proposée dans la figure 1.11. A l'échelle de la couche limite, d'épaisseur δ , on distingue tout d'abord deux régions :

- la zone “externe” dans laquelle la structure de l'écoulement est entièrement contrôlée par la turbulence. Le phénomène de transport moléculaire y est négligeable, et les tourbillons de grande échelle participent à l'essentiel du transport diffusif. Les échelles qui la caractérisent sont des échelles convectives, δ pour l'échelle de longueur, et U_∞ la vitesse extérieure (ou au centre de la conduite) pour l'échelle de vitesse ;
- la zone “interne”, qui caractérise la région de très proche paroi. Elle est mince au regard de la zone externe. C'est le lieu de phénomènes pilotés à la fois par la diffusion moléculaire et la diffusion turbulente. L'écoulement y est fortement cisailé, modifiant les propriétés de la turbulence par rapport à la zone externe : 1) la présence de la paroi provoque la coupure des échelles turbulentes, car les tourbillons dont la taille est supérieure à la distance à la paroi ne peuvent subsister ; 2) les fluctuations de vitesse sont amorties dans la direction de la paroi ce qui induit à une anisotropie de la turbulence. Les échelles qui la caractérisent sont des échelles diffusives : la vitesse de friction u_τ , et la longueur de friction $y_\tau = \nu_w/u_\tau$. Les unités pariétales (notées avec un exposant “+”) sont alors utilisées ($y^+ = y/y_\tau$ et $u^+ = u/u_\tau$) pour donner une vision “universelle” du comportement de l'écoulement dans cette région.

Pour illustrer l'anisotropie de la turbulence dans la région interne, le triangle de Lumley [185] est présenté dans la figure 1.12 pour un écoulement en canal périodique. Chaque point représente une distance à la paroi dans le plan (ξ, η) , où η et ξ sont des coefficients respectivement issus du

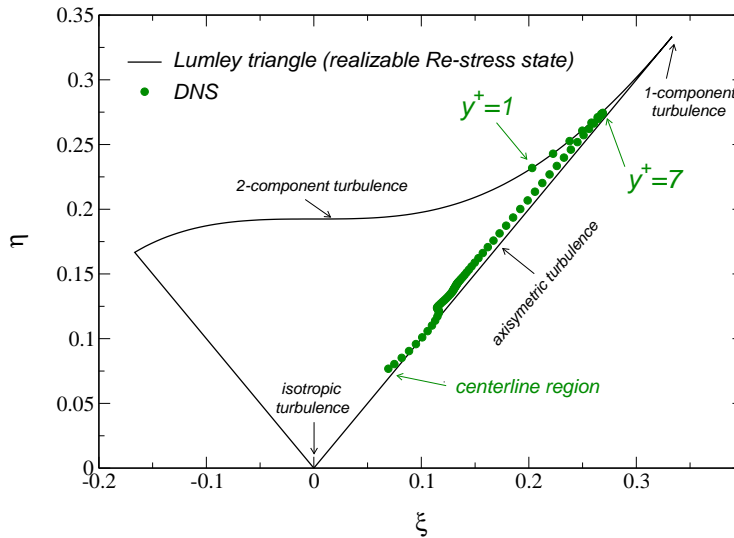


Figure 1.12 : Triangle de Lumley pour un écoulement de canal périodique. Les résultats sont issus d'une DNS effectuée pour cette thèse (cas A des calculs présentés au chapitre 2).

second et du troisième invariant du tenseur d'anisotropie des tensions de Reynolds⁸. Les frontières du "triangle" délimitent l'espace des réalisations possibles de l'écoulement, et renseignent sur la nature de la turbulence (isotrope, à une composante, à deux composantes, ou axi-symétrique). On constate que la turbulence est essentiellement à deux composantes près de la paroi, dans la région $y^+ < 7$, car les fluctuations de vitesse normale à la paroi sont négligeables devant les composantes tangentielles. L'anisotropie atteint un pic pour $y^+ = 7$. Au delà, la turbulence est axi-symétrique et se rapproche de l'isotropie au fur et à mesure qu'on s'écarte de la paroi.

L'examen de la région interne, révèle l'existence de trois parties distinctes (figure 1.11) :

- la "sous-couche visqueuse" ($y^+ < 5$) : dans cette zone, les phénomènes sont essentiellement laminaires car l'activité de la turbulence est presque inexistante. La diffusion turbulente est négligeable devant la diffusion moléculaire.
- la "sous-couche inertielle" (ou zone "logarithmique") ($y^+ > 30$) : dans cette zone, les transports diffusifs turbulents sont prépondérants devant les phénomènes moléculaires. On l'appelle zone "inertielle", zone "logarithmique", ou encore zone "à l'équilibre"⁹ car la production et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente sont du même ordre de grandeur, ce qui correspond à la notion d'équilibre universel de Kolmogorov. Cet équilibre a pu être vérifié, aussi bien expérimentalement qu'avec des simulations numériques. La figure 1.13 présente notamment les résultats d'une DNS réalisée par Moser *et al.* [161]. Cette figure montre clai-

⁸Les tensions de Reynolds représentent une corrélation entre deux composantes de vitesse fluctuante.

⁹A ne pas confondre avec la notion de "couche limite à l'équilibre", correspondant aux couches limites qui conservent leur comportement auto-similaire dans la direction de l'écoulement (selon Clauser [48]).

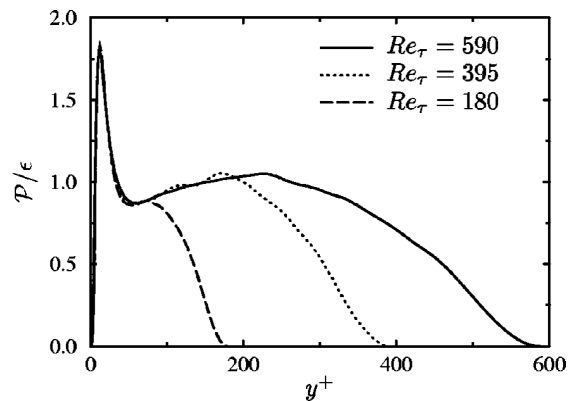


Figure 1.13 : Evaluation du rapport entre production, \mathcal{P} , et dissipation, ϵ , de l'énergie cinétique turbulente dans une DNS de canal périodique. Résultats de Moser et al. [161].

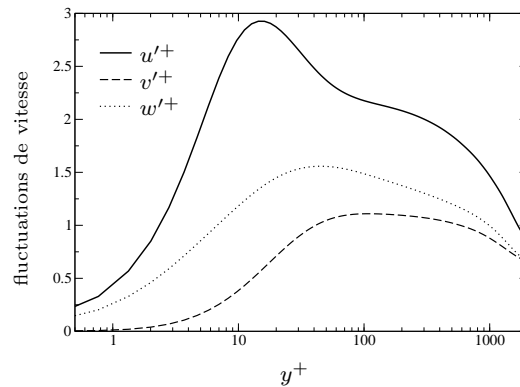


Figure 1.14 : Fluctuations de vitesse rms (“root-mean-square”, désigne l'écart type d'une variable) en unités pariétales. DNS de Hoyas & Jiménez [95] à $Re_\tau = 2000$.

rement que le rapport entre production et dissipation est de l'ordre de l'unité, à condition que le nombre de Reynolds soit suffisamment élevé pour qu'on puisse définir l'existence d'une région inertielle.

- la “sous-couche tampon” ($5 < y^+ < 30$) : il s'agit de la région de raccordement entre la sous-couche visqueuse et la sous-couche inertielle. La diffusion moléculaire y est du même ordre de grandeur que la diffusion turbulente. Aucune séparation d'échelle ne peut être considérée ce qui complique la compréhension de l'écoulement dans cette zone. On confère à cette région l'existence du maximum de production de l'énergie cinétique turbulente, qui intervient autour de $y^+ = 15$. Ce résultat est présenté sur la figure 1.14 où les profils des fluctuations de vitesse de la DNS de Hoyas & Jiménez [95] sont présentés en unités pariétales.

1.2.3 Couche limite turbulente dans une tuyère de moteur à propulsion solide

La présentation générale qui vient d'être faite vaut pour les couches limites turbulentes canoniques (nombre de Mach faible, paroi lisse, pas de transfert de chaleur, aucun effet du gradient de pression). Les couches limites turbulentes qui se développent dans les tuyères des moteurs à propulsion solide sont bien plus complexes. Elles sont en effet sujettes à l'ensemble, disons même à la totalité, des phénomènes physiques qui influencent le comportement d'un écoulement pariétal, et l'écartent de son comportement canonique. Dans cette application, la caractérisation des couches limites ne se cantonne pas à l'analyse de la seule variable vitesse, mais à l'examen complet de l'interaction entre la vitesse, l'énergie, la concentration des espèces et la masse volumique. On peut lister les paramètres influents comme suit :

- **nombre de Mach** de l'écoulement : le nombre de Mach est un nombre sans dimension qui quantifie le rapport entre la vitesse de l'écoulement et la vitesse du son. Dans une tuyère, l'écoulement est accéléré, et le nombre de Mach peut passer de 0.2 dans le convergent à 4 (voire 5) dans le divergent. Lorsque le nombre de Mach est élevé, le fluide est soumis à un phénomène de compressibilité (variation de sa masse volumique) car les fluctuations de pression deviennent significatives ;
- **gradient de température** significatif : sous l'effet d'un gradient de température normal à la paroi, la notion de couche limite thermique devient essentielle. L'échange de chaleur entre la paroi et le fluide doit être pris en compte lors de la conception d'un appareil si on veut assurer l'intégrité des composants structuraux. Les applications industrielles telles que les moteurs à pistons, les moteurs d'avions et d'hélicoptères, ou les circuits de refroidissement des centrales nucléaires sont directement concernés. Dans les moteurs à propulsion solide, les gaz issus de la combustion du propergol atteignent une température d'environ $3000K$, alors que la température des parois est de l'ordre de $500K$ en régime transitoire, et se stabilise autour de $2700K$ en régime nominal de fonctionnement. La compréhension des couches limites thermiques est donc indispensable dans une tuyère. De plus, lorsque le gradient de température devient significatif, la présence d'un transfert de chaleur s'accompagne d'un effet de compressibilité du fluide lié à ses propriétés de dilatabilité. Sous cet effet, la masse volumique du fluide varie dans la couche limite et les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie ne peuvent plus être considérées séparément. Dans ce cas, il faut examiner le système couplé dans son ensemble ce qui complique la compréhension de l'écoulement. Outre la masse volumique, la viscosité du fluide ou sa capacité calorifique à pression constante sont aussi susceptibles de varier sous l'influence d'un gradient de température. D'une manière générale, on parlera alors de couche limite à propriétés variables [215, 46, 166, 59] ;

- **nombre de Prandtl moléculaire** du fluide : défini par la relation $Pr = \nu/a$, c'est un nombre sans dimension qui quantifie le rapport entre la viscosité cinématique, ν , et la diffusivité thermique du fluide, a . Il s'agit d'une propriété intrinsèque du fluide. Il renseigne directement sur le rapport des épaisseurs des couches limites laminaires dynamiques et thermiques. Ainsi pour un écoulement laminaire, si $Pr = 1$, les profils adimensionnés de vitesse et de température seront similaires. Pour $Pr < 1$ (de l'air par exemple), la couche limite thermique laminaire d'un écoulement sera plus épaisse que sa couche limite dynamique, alors que pour $Pr > 1$ (de l'eau par exemple) on observera le comportement inverse. En régime turbulent, le nombre de Prandtl agit essentiellement dans la sous-couche visqueuse. Ainsi, au même nombre de Reynolds, deux couches limites qui ont des nombres de Prandtl différents pourront avoir le même profil moyen de vitesse mais des profils de température qui divergent [111, 112]. Il est donc indispensable d'inclure ce paramètre dans toute étude s'intéressant au transfert pariétal de chaleur ;
- **gradient de pression longitudinal** : généralement, le gradient de pression dans la direction \vec{x} de l'écoulement est considéré comme nul. Cette approximation facilite grandement l'étude des couches limites car le terme des forces de pression disparaît dans les équations de conservation de la quantité de mouvement (1.3) et de l'énergie (1.4). Néanmoins, dans les configurations où un changement de géométrie contraint l'écoulement à accélérer ou à décélérer, le gradient de pression doit être absolument pris en compte pour comprendre la structure de la couche limite. Un gradient de pression adverse ($\partial p/\partial x > 0$) peut mener au décollement de la couche limite [224, 163, 214, 101, 90], alors qu'un gradient de pression favorable ($\partial p/\partial x < 0$), au dessus d'un certain seuil, mènera à la relaminarisation de la couche limite [12, 115]. Cet aspect concerne directement les écoulements de tuyère qui sont sujets à un gradient de pression favorable imposé par la variation géométrique de la section de passage. L'effet du gradient de pression est encore un phénomène mal maîtrisé, et reste un véritable challenge en termes de modélisation. De nombreuses études du moment [77, 26] utilisent une "colline" ou une "bosse" ("bump" en anglais) placée dans l'écoulement pour étudier ce phénomène ;
- **fluide multi-espèces réactif** : les gaz qui s'écoulent dans les moteurs à propulsion solide sont issus de la combustion d'un propergol qui délivre des centaines d'espèces chimiques. Les termes multi-espèces doivent être introduits dans les équations de Navier-Stokes pour décrire l'écoulement, ce qui complique sérieusement les analyses. L'écoulement est notamment le lieu de réactions chimiques qui conduisent à un dégagement ou une consommation d'énergie sous l'effet de la formation et de la rupture des liaisons moléculaires. Il faut donc prendre en compte ce transfert d'énergie pour comprendre la structure de la couche limite thermique. De plus, la concentration des espèces varie ce qui conduit à l'étude du transport de chaque espèce pour bien comprendre la globalité du phénomène ;

- **transferts radiatifs** : les transferts radiatifs sont très souvent négligés. Cependant, dans les applications où les gradients de température sont conséquents, on peut se poser la question de l'influence du rayonnement sur le flux de chaleur pariétal. Dans le cas des fluides multi-espèces, cette question est d'autant plus justifiée car le milieu gazeux peut absorber ou émettre localement de l'énergie suivant sa composition chimique. Potentiellement, si cette interaction entre rayonnement et écoulement devient forte, on peut donc s'attendre à une modification de la structure de la couche limite ;
- **ablation des parois** : processus d'érosion de la paroi. Il est généralement lié à un phénomène d'oxydation thermo-chimique de la paroi, qui résulte de l'affinité entre les espèces de l'écoulement et la composition atomique du matériau de la structure. Des réactions hétérogènes de surface sont alors possibles si l'état thermodynamique du système (température, pression) est suffisant. C'est un phénomène clé pour l'étude des écoulements pariétaux dans les moteurs à propulsion solide car l'ablation de la structure entraîne une variation de la géométrie ce qui modifie les propriétés de poussée de l'appareil. En contrepartie, le phénomène d'ablation s'accompagne d'une réduction des transferts thermiques vers la structure, ce qui assure son intégrité. En effet, si la paroi n'était pas ablatable, les contraintes thermiques seraient telles qu'on observerait un fluage néfaste au bon fonctionnement de la tuyère, menant même à sa détérioration. Il s'agit en fait de la réponse du matériau de surface à une contrainte thermodynamique et chimique : on parlera pour cette raison d'ablation "thermo-chimique"¹⁰. Lors de la conception des tuyères, il est donc indispensable de prévoir ce phénomène pour assurer l'intégrité de l'appareil et pour que le moteur puisse emporter sans difficulté la charge utile qui lui est destinée ;
- **transpiration des parois** : un flux de masse passe au travers de la paroi. On parlera de surface transpirante, ou perméable. Ce phénomène modifie considérablement la structure de la couche limite [235, 86]. Pour une paroi débitante (flux de masse orienté vers la couche limite), l'écoulement est déstabilisé par un effet de soufflage, les fluctuations de vitesse sont plus intenses et leur maximum est observé plus près de la paroi que pour une surface perméable. Pour une paroi aspirante (flux de masse orienté vers la paroi), on observe le comportement inverse : l'aspiration de l'écoulement stabilise la couche limite, les fluctuations de vitesse sont atténuées et leur maximum est déplacé un peu plus loin au-dessus de la paroi. Dans une tuyère, le phénomène de soufflage intervient forcément lorsque la structure est ablatée, car la réaction hétérogène transforme le matériau solide en molécules à l'état gazeux qui sont éjectées vers l'écoulement. La vitesse convective résultante, normale à la paroi, est appelée "vitesse de Stephan" ;

¹⁰La tuyère peut également être érodée en raison de l'impact de particules solides. On parle alors d'ablation "mécanique". Ce phénomène intervient également dans les tuyères à cause de l'impact de particules aluminisées, mais son influence semble négligeable et reste difficile à déterminer. Il n'en sera pas question dans ce document.

- **rugosité des parois** : quand la paroi d'une tuyère est ablatée, des rugosités apparaissent sur la surface ce qui joue un rôle fondamental pour l'écoulement. Les rugosités ont notamment un effet sur le déclenchement de la transition laminaire/turbulence, ou sur l'augmentation des flux pariétaux. Ce dernier point avait été mis en évidence expérimentalement par Nikuradse [171] dans des écoulements en conduite dont les parois avaient été frottées par de la toile émeri. Dans de rares cas, la rugosité peut au contraire réduire le frottement jusqu'à 10% [249]. Il est donc extrêmement difficile de conclure de façon générale sur le comportement de ces écoulements. Pour faciliter l'étude, on introduit souvent le paramètre δ_r qui définit la hauteur des rugosités ($\delta_r^+ = \delta_r u_\tau / \nu_w$ en unités pariétales). En examinant le rapport de blocage δ / δ_r , on évalue tout d'abord l'encombrement des rugosités par rapport à l'épaisseur de la couche limite. Ainsi, si $\delta / \delta_r < 80$, l'écoulement est complètement modifié et ne suit pas les mécanismes classiques de la turbulence pariétale [102]. On préférera parler "d'écoulement sur obstacles", pour lesquels il est presque impossible de déterminer un comportement auto-similaire. Dans le cas où $\delta / \delta_r > 80$, on différencie deux régimes qui permettent de retrouver des similarités : 1) si $\delta_r^+ < 80$, l'écoulement est en régime "rugueux transitionnel" dans lequel les rugosités interfèrent avec la sous-couche tampon de la couche limite ; 2) si $\delta_r^+ > 80$, l'écoulement est "pleinement rugueux", et l'interaction avec l'écoulement se fait directement dans la zone inertielle¹¹. En ce qui concerne les écoulements de tuyère, la taille et la forme des rugosités varient suivant la nature des matériaux thermo-structuraux utilisés : par exemple, pour les matériaux composites l'échelle de longueur caractéristique des rugosités est directement liée à l'espacement entre les fibres de la matrice. Les rugosités sont ainsi comprises entre $50\mu m$ et $500\mu m$ pour des épaisseurs de couche limite atteignant $5mm$. L'écoulement subit tout le panel des régimes rugueux, ce qui rend la compréhension du phénomène ardue. En pratique, on constate une augmentation du flux de chaleur pariétal jusqu'à un facteur 1.7. Il est donc essentiel de prendre en compte cet aspect dans la conception des tuyères ;
- **courbure de la paroi** : outre l'introduction d'un gradient de pression local, la courbure de la surface peut avoir des conséquences sur les structures turbulentes de la couche limite. Que la paroi soit concave ou convexe, on peut en effet observer le développement d'une instabilité issue de la courbure de la paroi, qui se matérialise sous la forme de paires de tourbillons longitudinaux contrarotatifs. Ce sont les tourbillons de Görtler [200, 82]. Dans certaines tuyères, ces tourbillons apparaissent dans le divergent, sur l'ensemble du pourtour interne. Ces tourbillons sont le lieu d'échanges pariétaux intenses, qui laissent leur empreinte géométrique dans la structure de la tuyère lorsqu'ils sont combinés au phénomène d'ablation de la paroi. Après le tir de la fusée, on observe alors les sillons creusés par ces tourbillons. La compréhension et la modélisation de ce phénomène est un challenge à part entière.

¹¹Certains auteurs ajoutent un troisième régime pour $\delta_r^+ < 4$: le "régime lisse". Cependant, comme le souligne Jiménez [102], cette désignation ambiguë ne devrait pas être employée car ceci ne signifie pas que les rugosités n'ont aucun effet.

Variables	Ordre de grandeur
nombre de Reynolds	$10^5 < Re < 10^7$
échelle de longueur de la structure	$0.1 \text{ m} < L < 4 \text{ m}$
épaisseur de la couche limite	$1 \text{ mm} < \delta < 5 \text{ mm}$
plus petite échelle de la turbulence (échelle de Kolmogorov)	$l_k \sim 10 \mu\text{m}$
vitesse à l'extérieur de la couche limite	$50 \text{ m.s}^{-1} < u_\infty < 2500 \text{ m.s}^{-1}$
nombre de Mach	$0.1 < M < 4$
vitesse de Stephan (injection pariétale)	$v_{inj} \sim 10^{-2} \text{ m.s}^{-1}$
température à l'extérieur de la couche limite	$T_\infty \sim 3000\text{K}$
température de paroi	$500\text{K} < T_w < 2800\text{K}$
pression thermodynamique	$10^6 \text{ Pa} < p < 10^7 \text{ Pa}$
nombre d'espèces dans l'écoulement	~ 100 espèces
nombre de Prandtl	$0.3 < Pr < 0.5$
hauteur des rugosités	$50 \mu\text{m} < \delta_r < 500 \mu\text{m}$

Table 1.4 : Ordres de grandeur caractérisant l'écoulement dans les tuyères des moteurs à propulsion solide.

Afin de mieux définir les écoulements de couche limite dans les tuyères des moteurs à propulsion solide, la table 1.4 récapitule les ordres de grandeur caractéristiques qui permettent de saisir le défi que représente l'étude, la compréhension, et la modélisation de tels écoulements.

La table 1.5 rassemble les principaux travaux qui fournissent des études fines sur la structure des couches limites influencées par l'un des aspects précités. La table 1.6 complète cette liste en ne présentant que les études qui réunissent l'influence de plusieurs paramètres. Ces dernières sont beaucoup moins nombreuses. On constate que ces études sont aussi bien expérimentales que numériques. La démocratisation des méthodes numériques semble fournir un intérêt particulier pour les écoulements à nombre de Mach élevé car l'instrumentation est délicate dans ce cas. A contrario, les écoulements sur paroi rugueuse se prêtent mieux aux méthodes expérimentales car la géométrie de surface devient complexe ce qui n'aide pas à la définition d'une rugosité artificielle et au bon fonctionnement des méthodes numériques. De plus, comme le précise Jiménez [102], la réalisation d'une DNS en régime pleinement rugueux nécessite l'étude d'écoulements dont le nombre de Reynolds de friction est supérieur à 4000. Les moyens informatiques ne permettent pas encore d'atteindre ces valeurs (à ce jour, la plus grosse DNS de turbulence pariétale a été réalisée à $Re_\tau = 2000$ [95]). On remarque également la présence d'un manque de données de référence pour l'étude des couches limites thermiques sujettes à un gradient de pression, ainsi que pour l'étude des couches limites soumises aux transferts radiatifs et à l'ablation des parois.

Caractéristique de l'écoulement	Références	Type d'étude		Variables étudiées		
		e/i	expérimentale	numérique	vitesse	énergie
nombre de Mach élevé	Bradshaw [23]	e/i	●	-	●	-
	Spina <i>et al.</i> [227]	e/i	●	-	●	-
	Smith & Smit [218]	i	●	●	●	-
	Coleman <i>et al.</i> [50]	i	-	●	●	-
	Huang <i>et al.</i> [99]	i	-	●	●	●
	Guarini <i>et al.</i> [85]	e	-	●	●	-
	Martin <i>et al.</i> [145, 146, 144]	e	-	●	●	-
	Morinishi <i>et al.</i> [158]	i	-	●	●	●
	Brun <i>et al.</i> [29]	i	-	●	●	●
Ringuette <i>et al.</i> [195]	e	-	●	●	-	
nombre de Prandtl	Kawamura <i>et al.</i> [111, 112]	i	-	●	●	●
gradient de température	Cheng & Ng [46]	i	●	-	●	●
	Teitel & Antonia [237]	i	●	●	●	●
	Wang & Pletcher [251]	i	-	●	●	●
	Kawamura <i>et al.</i> [111, 112]	i	-	●	●	●
	Nicoud [166]	i	-	●	●	●
gradient de pression	Kearney <i>et al.</i> [115]	i	●	-	●	●
	Spalart [220]	e	-	●	●	-
	Spalart & Watmuff [224]	e	●	●	●	-
	Na & Moin [163]	e	-	●	●	-
	Fröhlich <i>et al.</i> [77]	i	-	●	●	-
	Indinger & Buschmann [101]	e	●	-	●	-
	Houra & Nagano [94]	e	●	-	●	●
	Hickel & Adams [90]	e	●	●	●	-
	Breuer <i>et al.</i> [26]	i	●	●	●	-
paroi rugueuse	Perry <i>et al.</i> [178, 177]	e	●	-	●	-
	Jiménez [102]	e/i	●	-	●	-
paroi transpirante	Wooldridge & Muzzy [255]	e	●	-	●	-
	Sumitani & Kasagi [235]	i	-	●	●	●
	Hahn <i>et al.</i> [86]	i	-	●	●	-
	Brillant <i>et al.</i> [27, 28]	e	●	●	●	●
	Mender & Nicoud [151]	-	-	●	●	-
écoulement réactif	Wooldridge & Muzzy [255]	e	●	-	●	-
	Artal [9]	i	-	●	●	●
rayonnement / ablation	-	-	-	-	-	-

Table 1.5 : Liste non exhaustive des principaux travaux sur l'analyse de la structure des écoulements pariétaux intégrant des **effets physiques complexes**. Travaux classés suivant le type de couche limite étudiée (**e/i** : écoulement externe ou interne), et l'approche retenue (expérimentale/numérique).

Références	phénomènes physiques étudiés	Type d'étude			Variables étudiées	
		e/i	exp.	num.	vitesse	énergie
Wooldridge & Muzzy [255]	paroi transpirante - écoulement réactif	e	●	-	●	-
Andersen <i>et al.</i> [8]	gradient de pression - paroi transpirante	e	-	●	●	-
Kawamura <i>et al.</i> [112]	nombre de Prandtl - gradient de température	i	-	●	●	●
Martín & Candler [145, 146]	nombre de Mach élevé - écoulement réactif	e	-	●	●	●
Houra & Nagano [94]	gradient de pression - gradient de température	e	●	-	●	●

Table 1.6 : *Liste non exhaustive des principaux travaux sur l'analyse de la structure des écoulements pariétaux multi-physiques. Travaux classés suivant le type de couche limite étudiée (e/i : écoulement externe ou interne), l'approche retenue pour générer les données analysées (expérimentale ou numérique), et les variables étudiées.*

L'étude de chacun de ces phénomènes suscite la curiosité des chercheurs depuis plusieurs décennies. A l'échelle d'un travail de thèse d'une durée de trois ans, il est difficilement envisageable d'étudier la totalité de ces aspects physiques. Nous avons donc fait le choix de nous concentrer sur l'étude des écoulements à nombre de Mach faible, sur parois lisses et planes. Comme nous le verrons, des simulations numériques directes ont permis d'aborder la question de l'aspect multi-espèces de l'écoulement, à nombre de Prandtl aléatoire, à masse volumique variable (sous l'influence d'un gradient de température significatif), et s'écoulant sur une surface ablatable. Les transferts radiatifs seront également étudiés, et la question du gradient de pression sera abordée en analysant un jeu de données fourni par Snecma Propulsion Solide.

1.3 Prédiction des flux pariétaux

Nous venons de le voir, lorsque le nombre de Reynolds est élevé, la description des écoulements pariétaux devient complexe. Les transferts de quantité de mouvement et de chaleur diffèrent d'une situation laminaire et on doit prendre en compte cet aspect lors de la conception d'un appareil. Plusieurs méthodes s'offrent aux ingénieurs, comme l'utilisation de corrélations empiriques pour les écoulements simples, ou le recours aux méthodes numériques pour des cas plus compliqués.

Le but est de déterminer à moindre coût le frottement pariétal, τ_w , et le flux de chaleur, q_w , auxquels sera soumise la structure de l'appareil (les flux de masse et des espèces doivent aussi être prédits dans une problématique d'ablation de surface). On présente dans cette section les multiples possibilités à la disposition d'un concepteur, en dissociant clairement l'approche employant des corrélations, de l'approche numérique qui nécessite un traitement particulier proche de la paroi. On s'intéressera principalement aux écoulements de référence, sans ablation, sur paroi lisse, sans gradient de pression, à nombre de Mach faible.

1.3.1 Corrélations théoriques et empiriques

L'approche utilisant des corrélations a été la première retenue par les scientifiques pour modéliser les transferts pariétaux. Ces corrélations sont issues de données expérimentales à partir desquelles on retrouve une similarité. Leur principe est de relier les flux pariétaux à des grandeurs globales : soit des grandeurs extérieures à la couche limite (vitesse/température de l'écoulement principal, température de paroi, ...); soit des propriétés intrinsèques du fluide (viscosité, nombre de Prandtl, ...). Leur forme est obtenue à partir de l'analyse théorique des équations de conservation et les coefficients libres sont fixés de façon empirique. Un excellent ouvrage qui compile plusieurs corrélations est dû à Kays, Crawford & Weigand [114]. On y trouve des corrélations pour les écoulements de couches limites canoniques, mais aussi pour prendre en compte des aspects tels que les propriétés variables du fluide, la transpiration des parois, ou encore la rugosité.

Ces corrélations font intervenir des nombres sans dimension caractérisant une auto-similarité de l'écoulement. Pour le frottement, on utilisera le coefficient de frottement, C_f . Pour le flux de chaleur, on pourra utiliser le nombre de Nusselt, Nu , ou le nombre de Stanton, St . Pour le flux de masse on utilisera le nombre de Sherwood, Sh . Dans ce qui suit on présente quelques corrélations pour le coefficient de frottement, et le nombre de Nusselt, qui sont les deux coefficients les plus utilisés. On s'intéressera surtout aux écoulements en conduite car cette configuration se rapproche d'un écoulement de tuyère.

- **le coefficient de frottement, C_f**

C'est un nombre sans dimension défini par la relation :

$$C_f = \frac{\tau_w}{\frac{1}{2}\rho_{\text{ref}} u_{\text{ref}}^2} \quad (1.33)$$

Il caractérise le rapport entre le frottement pariétal total, τ_w , et un flux de quantité de mouvement estimé à partir de grandeurs de référence, ρ_{ref} et u_{ref} . Pour ces données de référence, on peut choisir par exemple les quantités définissant l'écoulement à l'extérieur de la couche limite (ou au centre du canal). Dans ce cas, le coefficient de frottement sera noté C_{f_∞} , et défini à partir des grandeurs ρ_∞ et u_∞ . Ce choix ne permet pas de rendre compte des variations de propriétés du mélange dans la direction normale à la paroi (\vec{y} dans ce document). Pour cette raison, on préfère généralement utiliser des variables de référence intégrales, aussi appelées grandeurs de mélange ("bulk" en anglais). Ce coefficient de frottement sera alors noté C_{f_b} , et défini à partir de la masse volumique et de la vitesse de mélange, ρ_b et u_b :

$$\rho_b = \frac{1}{\delta} \int_0^\delta \bar{\rho} dy \quad (1.34)$$

$$u_b = \frac{\int_0^\delta \bar{\rho} \bar{u} dy}{\int_0^\delta \bar{\rho} dy} \quad (1.35)$$

où l'opérateur $\bar{\cdot}$ représente une moyenne statistique dans les directions homogènes de l'écoulement. Cet opérateur prend tout son sens dans l'étude des couches limites turbulentes (en régime laminaire, pour toute variable f , on aura $\bar{f} \equiv f$). On peut alors définir un nombre de Reynolds :

$$Re_{b,D_h} = \frac{\rho_b u_b D_h}{\mu_b} \quad (1.36)$$

basé sur la viscosité dynamique de mélange μ_b évaluée à la température de mélange T_b :

$$T_b = \frac{\int_0^\delta \bar{\rho} \bar{u} \bar{T} dy}{\int_0^\delta \bar{\rho} \bar{u} dy} \quad (1.37)$$

Dans ce nombre de Reynolds, la longueur de référence est le diamètre hydraulique :

$$D_h = \frac{4 \times \text{section de passage}}{\text{périmètre mouillé}} \quad (1.38)$$

Pour un écoulement laminaire en conduite, on peut relier le nombre de Reynolds de mélange au coefficient de frottement avec l'expression :

$$C_{f_b} = \frac{16}{Re_{b,D_h}} \quad (1.39)$$

Pour les écoulements en régime turbulent, on trouve différentes expressions dans la littérature, sous des formes plus ou moins compliquées. Les valeurs empiriques qui y apparaissent ont été choisies de telle sorte que la corrélation donne les meilleurs résultats vis à vis d'un jeu de données expérimentales. L'équation de Kármán-Nikuradse est très souvent utilisée en conduite :

$$\frac{1}{\sqrt{C_{f_b}/2}} = 2.46 \ln \left(Re_{b,D_h} \sqrt{C_{f_b}/2} \right) + 0.3 \quad (1.40)$$

Cependant, elle ne permet pas d'obtenir une relation explicite entre le coefficient de frottement et le nombre de Reynolds. On peut alors utiliser l'équation suivante :

$$C_{f_b} = 0.046 Re_{b,D_h}^{-0.2} \quad \text{pour } 3 \times 10^4 < Re_{b,D_h} < 10^6 \quad (1.41)$$

qui donne des résultats très proches de ceux de l'équation (1.40) sur une plage de nombres de Reynolds importante, $3 \times 10^4 < Re_{b,D_h} < 10^6$. Une autre expression qui permet de retrouver les résultats de l'équation de Kármán-Nikuradse à été proposée par Petukhov [179] :

$$C_{f_b} = 2 (2.236 \ln Re_{b,D_h} - 4.639)^{-2} \quad \text{pour } 10^4 < Re_{b,D_h} < 5 \times 10^6 \quad (1.42)$$

Cette corrélation donne une relation explicite du coefficient de frottement, et prend en compte une gamme de nombres de Reynolds plus vaste que l'équation (1.41).

Dans le cas où les variations de température sont importantes, les corrélations doivent prendre en compte les variations des propriétés du fluide. On utilise alors une fonction de correction qui donne une nouvelle expression du coefficient de frottement à propriétés variables, $C_{f,vp}$, à partir de la corrélation à propriétés constantes, C_f . Kays *et al.* [114] proposent d'employer la relation suivante, qui vaut pour les écoulements gazeux en conduite¹² :

$$C_{f,vp} = C_f \left(\frac{T_w}{T_b} \right)^{-0.1} \quad \text{en conduite, pour un gaz} \quad (1.43)$$

où T_w représente la température de la paroi. Dans cette expression, C_f peut être remplacé par n'importe quelle corrélation à propriétés constantes, les équations (1.41) et (1.42) par exemple.

• **le nombre de Nusselt, Nu**

C'est un nombre sans dimension défini par la relation :

$$Nu = \frac{q_w}{\lambda_{ref} \frac{T_w - T_{ref}}{L_{ref}}} \quad (1.44)$$

Il représente le rapport entre le flux de chaleur pariétal, q_w , et un flux de conduction (ou flux de Fourier) évalué à partir d'une conductivité de référence λ_{ref} , d'une température de référence T_{ref} , et d'une longueur de référence L_{ref} . Comme dans l'expression du coefficient de frottement, ces quantités de référence peuvent être extérieures à la couche limite (notées avec l'indice "∞"), ou des quantités de mélange (notées avec l'indice "b"). Certaines corrélations pour le nombre de Nusselt emploient également les valeurs de "film" qui correspondent aux propriétés du mélange évaluées à la température de film :

$$T_f = \frac{T_w + T_b}{2} \quad (1.45)$$

Pour la longueur de référence, on utilise généralement le diamètre hydraulique, D_h . Il existe de multiples corrélations pour les transferts thermiques. Une même expression peut très bien être basée sur l'utilisation de deux références différentes : composition entre grandeurs de mélange et de film. C'est par exemple le cas lorsque le nombre de Reynolds de film, Re_{f,D_h} , apparaît dans une corrélation :

$$Re_{f,D_h} = \frac{\rho_f u_b D_h}{\mu_f} \quad (1.46)$$

où μ_f est la viscosité dynamique du fluide évaluée à la température de film, et ρ_f la masse volumique de film qu'on peut estimer à partir de la relation $\rho_f = 2 (1/\rho_w + 1/\rho_b)^{-1}$. Il faut donc manipuler ces corrélations avec précaution.

Pour les écoulements turbulents établis en conduite, on pourra utiliser par exemple la corrélation de Colburn [236] :

$$Nu_{D_h,C} \equiv \frac{q_w}{\lambda_f \frac{T_w - T_b}{D_h}} = 0.023 Re_{f,D_h}^{0.8} Pr^{1/3} \quad (1.47)$$

¹²Pour un liquide, la correction s'effectue par l'intermédiaire du rapport des viscosités dynamiques, μ_w/μ_b .

Le domaine de validité de cette corrélation vaut selon l'auteur pour des écoulements établis, avec $Re_{f,D_h} > 10^4$, et une gamme de nombre de Prandtl $0.7 < Pr < 160$. Lorsque le nombre de Prandtl ne dépasse pas la dizaine, il est préférable d'utiliser la corrélation donnée par Kays *et al.* [114] qui fourni de meilleurs résultats :

$$Nu_{Dh,K} \equiv \frac{q_w}{\lambda_b \frac{T_w - T_b}{D_h}} = \frac{0.023 Re_{f,D_h}^{0.8} Pr}{0.88 + 2.03 (Pr^{2/3} - 0.78) Re_{f,D_h}^{-0.1}} \quad (1.48)$$

sur le domaine de validité, $3 \times 10^4 < Re_{f,D_h} < 10^6$ et $0.6 < Pr < 6$.

Pour corriger ces corrélation sous l'influence des variations de propriétés du fluide, on pourra utiliser la relation correctrice suivante :

$$Nu_{vp} = Nu \left(\frac{T_w}{T_b} \right)^n \quad \text{avec} \quad \begin{cases} n = 0 & \text{si } T_w/T_b < 1 \\ n = - \left[\log_{10} \left(\frac{T_w}{T_b} \right) \right]^{1/4} + 0.3 & \text{si } 1 < T_w/T_b < 5 \\ n = -0.5 & \text{si } T_w/T_b > 5 \end{cases} \quad (1.49)$$

où Nu_{vp} est le nombre de Nusselt qui prend en compte les variations de propriétés, et Nu le Nusselt de référence qui peut être issu des corrélation (1.47) ou (1.48), ou d'une autre corrélation de son choix à propriétés constantes. La fonction de correction (1.49) n'est valable que pour un écoulement gazeux en conduite. Pour les plages $T_w/T_b < 1$ et $T_w/T_b > 5$, la valeur de n est issue de Kays *et al.* [114], alors que pour $1 < T_w/T_b < 5$, la valeur de n est donnée par Sleicher & Rouse [215].

Lorsque le gradient de température reste modéré, $T_w/T_b < 2$, il est fortement recommandé d'utiliser la corrélation proposée par Sleicher & Rouse [215], qui prend en compte directement les variations de propriétés, et dont la validité s'étend sur une vaste plage de nombre de Prandtl $0.1 < Pr < 10^5$:

$$Nu_{Dh,SR} \equiv \frac{q_w}{\lambda_b \frac{T_w - T_b}{D_h}} = 5 + 0.015 Re_{f,D_h}^a Pr^b \quad \text{avec} \quad \begin{cases} a = 0.88 - \frac{0.24}{4 + Pr} \\ b = \frac{1}{3} + 0.5 \exp(-0.6 Pr) \end{cases} \quad (1.50)$$

Cette corrélation est valable pour des écoulement établis en conduite dont le nombre de Reynolds reste dans la gamme $10^4 < Re_{f,D_h} < 10^6$.

• avantages/inconvénients des corrélation

L'utilisation de ces corrélation se justifie dans les cas où l'écoulement est bien défini, en géométrie simple (conduite cylindrique par exemple), pour des écoulements développés, et sans phénomènes physiques particuliers. En utilisant ces corrélation dans leur domaine de validité, on

pourra obtenir une très bonne prédiction des flux pariétaux. Un ingénieur trouvera aussi dans ces relations un intérêt pour les phases d'avant projet, lorsque les grandeurs accessibles qui définissent le problème ne sont pas déterminées avec précision (géométrie ou propriétés du fluide).

Lorsque les conditions de l'écoulement se compliquent, l'utilisation des corrélations devient délicate, voire impossible. Pour des écoulements complexes la notion de quantités de film et de mélange devient floue. De plus, ces relations algébriques ne donnent accès qu'à des grandeurs intégrales qui gardent leur sens si l'écoulement conserve une similarité spatio-temporelle. On ne pourra donc pas les utiliser pour les applications complexes qui nécessitent une observation locale et instationnaire de l'écoulement. Pour cette même raison, les corrélations ne pourront pas être utilisées pour résoudre l'écoulement dans un code de calcul numérique. Dans ce cas, on doit utiliser une méthode qui ne fait appel qu'à des variables locales. Une approche par "modèles de paroi" est alors préférée. On présente quelques modèles dans la section qui suit.

1.3.2 Modèles de paroi pour la simulation numérique, état de l'art.

La littérature est riche à ce sujet. Les études sont orientées suivant la nature physique du problème à modéliser, suivant l'approche de modélisation de la turbulence (code RANS ou LES), suivant la méthode numérique de résolution des équations (cell-vertex¹³, cell-centered ou vertex-centered), et suivant les capacités propres du code de calcul (manipulation de maillages structurés/non-structurés/hybrides, emploi de frontières immergées [197], ...). Le nombre de combinaisons entre tous ces paramètres est important ce qui complique sérieusement la définition d'un modèle de paroi universel.

1.3.2.a) concept des modèles de paroi

Le temps de calcul d'une simulation numérique est directement lié au nombre de points nécessaires pour décrire l'écoulement. Dans les régions de proche paroi, les gradients sont généralement plus importants que dans le reste de l'écoulement, et un nombre conséquent de points doit être utilisé. Chapman [41] évalue en effet que le nombre de points nécessaires à la résolution de la zone interne de la couche limite varie comme $Re_\delta^{1.8}$ (avec Re_δ le nombre de Reynolds basé sur l'épaisseur de la couche limite et la vitesse externe). Piomelli [180] étend cette estimation en prenant en compte le temps de simulation nécessaire pour obtenir une bonne convergence des statistiques. Il estime alors que le coût total d'une simulation résolue évolue comme $Re_\delta^{0.6}$ pour résoudre la zone externe de la couche limite, et comme $Re_\delta^{2.4}$ pour la zone interne. Les calculs résolus restent donc marginaux et ne sont envisageables que sur plusieurs centaines de processeurs si $Re_\delta < 10^5$. Le nombre de Reynolds des applications industrielles est souvent plus élevé, et le

¹³L'annexe B présente différentes approches pour l'intégration d'un modèle de paroi dans un code LES utilisant une méthode cell-vertex.

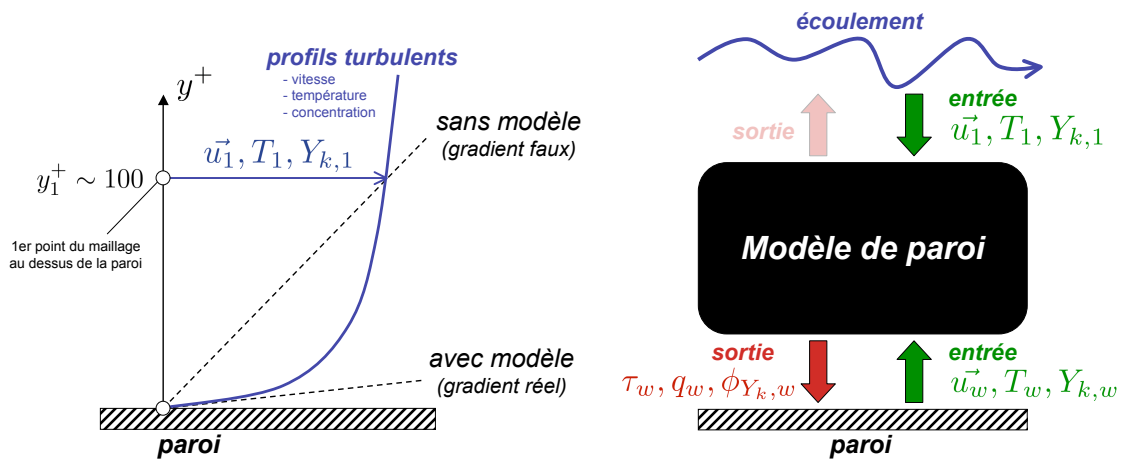


Figure 1.15 : (à gauche) Estimation des gradients pariétaux dans un code de calcul, avec et sans modèle de paroi. (à droite) Modèle de paroi vu comme une boîte noire. Les données d'entrée proviennent de la paroi ou de l'écoulement. Les données de sortie sont généralement des flux appliqués sur la paroi, mais dans certains modèles, on renvoie également des valeurs vers l'écoulement.

nombre de processeurs disponibles inférieur à la centaine. Un calcul résolu est donc à ce jour hors de considération, non seulement à cause du coût financier d'un tel calcul, mais aussi car le temps de restitution serait beaucoup trop contraignant à l'échelle de la durée d'une phase de conception.

Une des stratégies consiste donc à minimiser le nombre de points dans la région pariétale, tout en prescrivant une valeur correcte des flux sur les faces des premières cellules adjacentes à la paroi. Comme le montre la figure 1.15 (gauche), un maillage trop grossier sans modèle conduit à une mauvaise estimation des gradients des variables transportées. Les profils turbulents corrects ne peuvent pas être estimés par le schéma numérique, car une simple extrapolation ne suffit pas (quel que soit son ordre). En effet, pour une bonne prédiction, le processus d'extrapolation doit rendre compte de la physique contenue dans les équations de Navier-Stokes. C'est là tout le principe des modèles de paroi.

Le modèle assure ainsi le lien entre la paroi et le premier point de calcul situé dans l'écoulement, à partir de la connaissance de grandeurs locales. La figure 1.15 (droite) illustre ce principe. Les données d'entrée du modèle de paroi peuvent être issues de l'écoulement (vitesse, température, concentration des espèces), ou de données provenant des conditions de paroi (condition d'adhérence, vitesse de glissement, température de paroi). Les données de sortie sont généralement les flux pariétaux utilisés comme conditions aux limites pour corriger ceux calculés en premier lieu par le code Navier-Stokes. Dans certains cas le modèle de paroi donne également des informations de sortie appliquées au niveau de l'écoulement (voir l'annexe B par exemple). Précisons que pour être complet, le modèle de paroi doit fournir une relation pour l'ensemble des variables transportées dans le code de calcul : quantité de mouvement, température, fractions massiques des espèces, énergie cinétique turbulente et sa dissipation (pour les codes RANS).

1.3.2.b) revue des différentes approches

L'objectif principal de cette thèse est de progresser dans l'utilisation de modèles de paroi pour les codes de calcul RANS. Dans cette section on présente cependant les différentes approches possibles sous l'angle de vue des calculs LES, car ces derniers suscitent un engouement de plus en plus prononcé de la part des industriels. De plus, certaines réponses à la problématique de modélisation pariétale sont utilisables aussi bien dans les codes RANS que LES.

Les codes de calcul RANS sont maintenant répandus dans l'industrie. Le terme "bas-Reynolds" désigne un calcul dans lequel les couches limites sont entièrement résolues (distance à la paroi du premier point de calcul autour de $y_1^+ \approx 1$). Cette dénomination s'oppose au terme "haut-Reynolds" qui caractérise les calculs utilisant un modèle de paroi (distance à la paroi du premier point de calcul de l'ordre de $y_1^+ \sim 100$). Dans ces calculs "haut-Reynolds", on emploie des relations algébriques issues de l'intégration des équations de Navier-Stokes sous certaines hypothèses.

Les codes de calcul LES offrent des opportunités de modélisation plus nombreuses. On peut par exemple utiliser des modèles de sous-maille spécialement conçus pour les régions de proche-paroi [168]. Cette méthode reste néanmoins coûteuse car la distance du premier point ne doit pas excéder $y^+ \approx 5$. Elle est donc essentiellement destinée aux calculs de laboratoire. Pour atteindre un temps de calcul raisonnable, on recense en fait trois grandes familles de modèles de paroi pour la LES : les lois de paroi du même type que pour l'approche RANS "haut-Reynolds", les approches zonales, et les approches hybrides. En voici une brève présentation qui pourra être complétée par la lecture des récentes revues de Piomelli & Balaras [181, 180].

• les lois de paroi (ou modèles algébriques)

Il s'agit de la méthode la plus répandue. Utilisée aussi bien pour des calculs RANS que LES, elle consiste à intégrer les équations de Navier-Stokes sous certaines hypothèses, en utilisant une normalisation appropriée. Une relation algébrique est alors obtenue entre les flux pariétaux et les grandeurs de l'écoulement transportées par la méthode numérique. Si la relation algébrique obtenue n'est pas explicite, on devra utiliser une méthode d'inversion pour obtenir les valeurs à prescrire en tant que conditions aux limites. Pour introduire l'approche par lois de paroi, on présente ici les modèles "standards" pour la couche limite dynamique et thermique.

L'introduction des échelles caractéristiques de la région interne de la couche limite :

$$y_\tau = \frac{\bar{\nu}_w}{u_\tau} \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\bar{\tau}_w}{\rho_w}} \quad T_\tau = \frac{\bar{q}_w}{\rho_w C_{p,w} u_\tau} \quad (1.51)$$

permet de définir une distance, une vitesse, et une température, exprimées en unités pariétales :

$$y^+ = \frac{y}{y_\tau} = \frac{\bar{\rho}_w u_\tau y}{\bar{\mu}_w} \quad u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} \quad T^+ = \frac{\bar{T}_w - \bar{T}}{T_\tau} \quad (1.52)$$

où l'opérateur $\overline{\cdot}$ représente une moyenne statistique dans les directions homogènes de l'écoulement. A partir de ces unités, on peut écrire les lois de paroi standard pour la vitesse et la température. Leur dérivation est présentée dans les ouvrages classiques de mécanique des fluides [114], et repose sur la simplification des équations de Navier-Stokes selon les hypothèses suivantes :

- le nombre de Reynolds est infini ($\delta \rightarrow \infty$);
- l'écoulement est mono-espèce ;
- on cherche une solution moyenne stationnaire (équations filtrées au sens RANS);
- l'écoulement est établi, les variables ne dépendent que de la direction normale à la paroi ;
- le fluide est newtonien et ses propriétés sont constantes (viscosité, masse volumique, capacité calorifique à pression constante, conductivité thermique);
- le gradient longitudinal de pression est négligeable ;
- le terme d'échauffement visqueux est négligeable (*i.e.* le nombre de Mach est faible) ;
- le frottement total et le flux de chaleur total sont constants dans la couche limite ;
- on peut modéliser les tensions de Reynolds par l'hypothèse de Boussinesq

$$-\overline{\rho u'v'} \approx \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (1.53)$$

- pour la viscosité turbulente μ_t on peut utiliser le modèle de longueur de mélange de Prandtl

$$\mu_t = \rho (\kappa y)^2 \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (1.54)$$

avec κ la constante de von Kármán, $\kappa = 0.41$;

- l'analogie de Reynolds permet de relier la viscosité turbulente à une conductivité turbulente par l'intermédiaire du nombre de Prandtl turbulent Pr_t , généralement considéré constant ($Pr_t \approx 0.9$). Le modèle turbulent pour la corrélation vitesse/température s'écrit alors :

$$\overline{\rho v'T'} = \frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{d\bar{T}}{dy} \quad (1.55)$$

Sous ces conditions, on aboutit à l'écriture de la loi de paroi standard pour la vitesse :

$$\begin{cases} u^+ = y^+ & \text{dans la sous-couche visqueuse, } y^+ < 5 \\ u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C_u & \text{dans la sous-couche inertielle, } 30 < y^+ \lesssim 0.2 \delta \end{cases} \quad (1.56)$$

où C_u est une constante d'intégration, généralement fixée à $C_u = 5.2$ pour les écoulements externes, et $C_u = 5.5$ pour les écoulements internes ou à faible nombre de Reynolds. On constate tout d'abord qu'il n'y a pas de modèle pour la sous-couche tampon ($5 < y^+ < 30$), car la séparation entre les échelles moléculaires et turbulentes n'est pas possible dans cette région. La fonction d'amortissement de Van Driest pour la viscosité turbulente pourrait décrire l'atténuation de l'activité turbulente dans cette région, mais dans ce cas l'intégration analytique des équations n'est plus possible. Afin d'utiliser l'équation (1.56) quelle que soit la position du premier point de calcul, on utilise en pratique une distance à la paroi de coupure $y_{c,u}^+ \approx 11$, qui délimite les domaines

d'utilisation de chacune des lois (1.56). La loi empirique de Reichardt [192] peut également être utilisée pour obtenir une expression unifiée du profil de vitesse :

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(1 + \kappa y^+) + 7.8 \left(1 - e^{-y^+/11} - \frac{y^+}{11} e^{-y^+/3} \right) \quad (1.57)$$

La loi de paroi standard pour la couche limite thermique s'écrit :

$$\begin{cases} T^+ = Pr y^+ & \text{dans la sous-couche visqueuse } y^+ < y_{c,T}^+ \\ T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa} \ln y^+ + C_T(Pr) & \text{dans la sous-couche inertielle } y^+ > y_{c,T}^+ \end{cases} \quad (1.58)$$

où la constante d'intégration $C_T(Pr)$ dépend du nombre de Prandtl moléculaire. La distance à la paroi $y_{c,T}^+$ qui délimite la sous-couche visqueuse de la région inertielle, dépend elle aussi du nombre de Prandtl moléculaire. On définit sa valeur comme la distance à laquelle s'intersectent la loi linéaire et la loi logarithmique. En 1981, Kader [108] propose une relation empirique pour la constante d'intégration $C_T(Pr)$ en examinant des données expérimentales sur une vaste gamme de nombre Prandtl, $6 \times 10^{-3} < Pr < 40 \times 10^3$:

$$C_T(Pr) = (3.85 Pr^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln Pr \quad (1.59)$$

où le coefficient 2.12 a été fixé en supposant $Pr_t \approx 0.85$, et $\kappa \approx 0.4$. Kader propose également l'utilisation d'une fonction de lissage, Γ qui permet d'unifier la loi laminaire et la loi turbulente de manière plus douce qu'en utilisant une distance à la paroi de coupure, et de représenter artificiellement le comportement de la sous-couche tampon :

$$T^+ = Pr y^+ e^\Gamma + [2.12 \ln(1 + y^+) + C_T(Pr)] e^{1/\Gamma} \quad \text{avec} \quad \Gamma = -\frac{10^{-2} (Pr y^+)^4}{1 + 5 Pr^3 y^+} \quad (1.60)$$

Cette loi sera définie comme la loi de paroi "standard" pour le profil de température. Elle est également valable pour le transport de n'importe quel scalaire passif, en remplaçant le nombre de Prandtl moléculaire par un nombre approprié caractérisant la diffusion du scalaire passif (nombre de Schmidt pour la concentration des espèces par exemple).

Ces lois de paroi ont été obtenues à partir d'équations moyennes de la couche limite stationnaire, et sont donc principalement destinées à des codes de calcul RANS. Cependant, leur utilisation pour les calculs LES se justifie en considérant que la taille de la première cellule de paroi est suffisamment grande pour contenir un échantillon statistique de structures turbulentes représentatif d'un écoulement moyen. Ainsi, Deardorff [62], Schumann [207], puis Grötzbach [84], sont les premiers à utiliser avec succès des lois de paroi dans les calculs LES. On remarquera également les travaux de Piomelli *et al.* [182] qui proposent une extension du modèle standard pour la vitesse, dans le but de prendre en compte dans le calcul LES l'inclinaison des structures qui se développent près de la paroi. Cette modification, basée sur les observations de Rajagoplan & Antonia [190], permet de fournir la bonne corrélation spatiale entre la vitesse du premier

point de calcul situé dans la couche limite et le frottement pariétal. Cette modification originale est intéressante mais ne paraît pas indispensable pour obtenir des résultats de bonne qualité [110].

L'approche de modélisation par lois de paroi reste la favorite pour les codes industriels. En comparaison avec ses méthodes concurrentes, elle offre l'avantage d'une implémentation relativement aisée, et présente d'excellentes qualités en termes de robustesse [152] et de temps de calcul (le coût total de la simulation évolue comme $Re_\delta^{0.6}$). Les résultats fournis par cette approche doivent forcément s'accompagner d'un regard critique, car leur domaine d'utilisation dépasse souvent le cadre fixé pour leur dérivation analytique. Par exemple, le nombre de Reynolds n'étant pas infini en pratique, il faut donc s'assurer que le premier point de calcul se situe bien dans la couche limite ($y_1 < \delta$), et plus précisément dans la zone inertielle, là où l'hypothèse de longueur de mélange de Prandtl reste valide ($y_1 < 0.2\delta$).

Afin d'étendre le domaine de validité des lois de paroi, on cherche désormais à intégrer de plus en plus de phénomènes physiques dans ces modèles algébriques. On remarquera notamment les travaux de So *et al.* [219], ou Huang *et al.* [97, 98] qui proposent des formulations capables de prendre en compte l'effet d'un nombre de Mach élevé. Stevenson [230, 231, 232], puis Simpson [212], présentent également des lois de parois pour les surfaces transpirantes. Pour la prédiction des écoulements décollés sous l'influence d'un gradient de pression adverse, on pourra consulter l'approche à deux échelles de vitesse présentée par Skote & Henningson [213, 214], reprise et testée par Shih *et al.* [209]. Il faut cependant distinguer les écoulements décollés des écoulements sujets à une modification brutale de la géométrie (marche descendante par exemple). Pour ces derniers, la question de la prédiction des zones de recirculation reste encore floue et ouverte dans la littérature. Il en est de même pour la configurations de jet impactant.

Les modèles intégrant des effets physiques complexes semblent fournir des résultats intéressants sur des tests *a priori*. Néanmoins, la démonstration de leur validité souffre trop souvent d'un manque de tests *a posteriori* dans la littérature, en particulier sur des configurations complexes.

- **les approches zonales** (aussi appelées TBLE)

Introduites en 1996 par les travaux de Balaras *et al.* [14], les approches zonales (aussi appelées TBLE, pour "Thin Boundary Layer Equations") sont de plus en plus utilisées dans les codes LES¹⁴. Sur ce sujet, on remarquera également les travaux de Cabot & Moin [34], Wang & Moin [250], ou encore Benarafa *et al.* [16, 17]. Le principe de cette approche repose sur la résolution d'équations simplifiées dans la première couche de cellules adjacentes à la paroi, alors que partout dans le reste du domaine les équations de Navier-Stokes filtrées sont résolues. La discrétisation des équations de couche limite simplifiées repose alors sur l'utilisation d'un maillage mono-dimensionnel, "embarqué" dans la première cellule entre le point de paroi et le premier point du maillage au-dessus de la paroi (voir la figure 1.16). Les conditions aux limites pour la

¹⁴Rien n'empêche en pratique d'utiliser l'approche TBLE dans une méthode RANS. C'est d'ailleurs ce que proposait Smith en 1990 [217], 6 ans avant la présentation de Balaras *et al.* pour les méthodes LES. Nicoud [165] utilise également cette méthode dans sa thèse. Cette option est intéressante mais rarement exploitée.

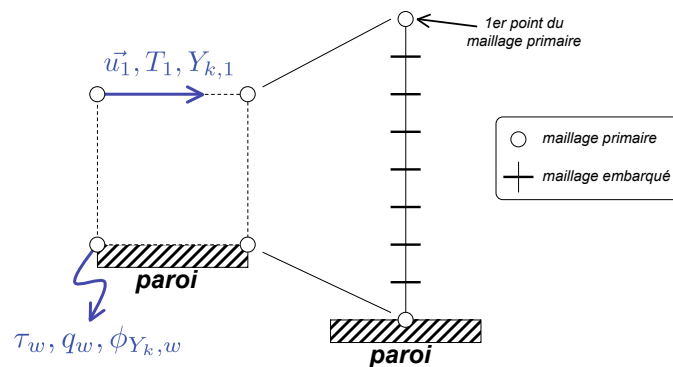


Figure 1.16 : Schéma de principe de l'approche TBLE. Des équations simplifiées sont résolues sur un maillage embarqué entre le point de paroi et le premier point du maillage.

résolution des équations simplifiées sont alors fixées par les conditions de paroi et par les valeurs prélevées au premier point de calcul. L'utilisation d'un maillage virtuel fin jusqu'à la paroi ($y^+ \approx 1$) permet ainsi d'obtenir une bonne prédiction des flux pariétaux, qui sont ensuite appliqués à la face de la première cellule du maillage primaire.

Les équations utilisées sur le maillage virtuel sont celles d'une couche limite bi-dimensionnelle : seules les composantes tangentielles de la vitesse sont transportées (la composante normale peut être obtenue par conservation de la masse). La longueur de mélange de Prandtl est généralement employée pour fermer le problème turbulent. De plus, les termes instationnaires ainsi que les termes de gradient de pression sont conservés dans les équations, ce qui permet *a priori* de prendre en compte plus de phénomènes physiques qu'une loi de paroi standard.

La méthode TBLE donne de bons résultats pour les écoulements de canal périodique, aussi bien pour la couche limite dynamique [17] que thermique [16]. Dans cette configuration simple, on retrouve cependant les mêmes problèmes qu'en utilisant une approche par lois de paroi : des structures non-physiques ressemblant à des streaks apparaissent dans la région de raccord avec la zone LES [34]. La présence de ces structures non-physiques, s'accompagne alors de pics de fluctuations des variables transportées trop intenses et mal positionnés près de la paroi. Après quelques cellules d'adaptation les fluctuations retombent bien sur les valeurs attendues. Ce phénomène perturbe également les profils moyens qui dévient légèrement du comportement logarithmique attendu dans la zone de raccord.

La méthode TBLE semble surtout présenter un intérêt pour les écoulements influencés par un gradient de pression longitudinal, mais dans ce cas, le modèle de fermeture du problème turbulent doit être adapté car le modèle de longueur de mélange de Prandtl n'est plus valide. Par rapport à l'utilisation de lois de paroi, des meilleurs résultats ont ainsi été obtenus sur des configurations de marche descendante [34] ou des écoulements décollés semblables à ceux rencontrés près du bord de fuite d'une aile d'avion [250].

Les variations de propriété du fluide peuvent également être prises en compte avec les méthodes

TBLE. Devesa [67] présente par exemple l'extension de cette approche pour les couches limites à masse volumique variable.

L'approche TBLE semble prometteuse, mais manque encore d'un peu de maturité. Elle commence néanmoins à voir le jour dans quelques codes de calcul à vocation industrielle. Un de ses inconvénients est la définition du maillage embarqué qui se prête bien à l'utilisation de maillages structurés, mais paraît plus délicate à mettre en oeuvre pour les grilles de calcul non-structurées employées pour les géométries complexes. De plus, des questions concernant l'utilisation de cette approche restent ouvertes, comme par exemple la capacité de la méthode à prédire la bonne épaisseur de la couche limite si le premier point de calcul se trouve à l'extérieur de celle-ci, ou encore son comportement si le premier point se situe dans la sous-couche tampon. L'évaluation de ces deux critères pourraient notamment justifier l'utilisation des méthodes TBLE par rapport à l'approche par loi de paroi qui trouve une limite à ce niveau. On pourrait également étudier l'intérêt de cette méthode sur des écoulements supersoniques, des parois rugueuses, transpirantes, ou même ablatées. Ce genre d'étude n'est cependant pas encore disponible dans la littérature.

Selon Piomelli [180], son coût total d'utilisation reste attractif car elle ne consommerait que 10% à 20% de ressources supplémentaires par rapport à l'approche par loi de paroi. Ce coût pourrait être réduit comme le suggère le récent travail de Monfort *et al.* [155], qui proposent une adaptation originale de la méthode TBLE. Le principe est équivalent, mais au lieu d'intégrer les équations simplifiées de la couche limite sur une grille de calcul embarquée, on procède à une intégration analytique. Cette méthode sans-maillage devrait donc converger vers la même solution que celle obtenue avec la méthode classique, mais à moindre coût (l'inversion numérique des fonctions analytiques est comparable à celle des lois de paroi). Sur un écoulement de canal périodique perturbé par la présence d'une colline, l'approche sans-maillage montre une amélioration mitigée des profils moyens, et apporte surtout des informations complémentaires pour la prédiction des grandeurs fluctuantes. On remarquera également les travaux de Craft, Suga *et al.* [56, 234], qui dans le même genre, propose une intégration analytique des équations de couche limite avec prise en compte du gradient de pression ainsi que des rugosités. Ce genre d'intégration analytique ouvre de nouvelles possibilités et pourrait par exemple être étendue à l'étude des couches limites thermiques instationnaires. La méthode sans-maillage devrait aussi permettre d'intégrer facilement l'effet de n'importe quel terme source dans les équations de conservation, comme le terme de flottabilité par exemple. Par contre, elle restera limitée aux écoulements pour lesquels le modèle de longueur de mélange de Prandtl (avec fonction d'amortissement de Van Driest) reste valide, ou aux écoulements dont le modèle de fermeture turbulent mène à une forme d'équation intégrable analytiquement.

• les approches hybrides

Cette méthode consiste à coupler une méthode RANS pour le calcul de la région pariétale, avec une approche LES pour résoudre le champ lointain (voir la figure 1.17). Elle diffère de l'approche TBLE, car les zones RANS et LES ont toutes les deux leurs propres échelles d'espace et de

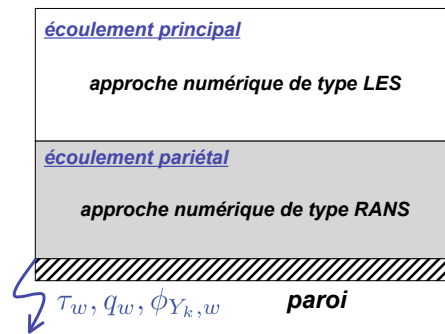


Figure 1.17 : Schéma de principe de l'approche hybride. Couplage entre deux méthodes de résolution des équations de Navier-Stokes, RANS/LES par exemple.

temps, qui communiquent à l'interface des deux domaines. Au contraire, dans les approches par lois de paroi et TBLE, c'est la zone externe qui impose directement ses échelles caractéristiques à la région pariétale modélisée. Ainsi le principal défi des méthodes hybrides RANS/LES réside dans le traitement des échanges d'informations entre la partie LES et la partie RANS.

Cette méthode connaît un intérêt de plus en plus prononcé dans la littérature depuis une dizaine d'années [170, 60, 238, 16, 24]. De nombreux modèles sont disponibles dans la littérature concernant les approches RANS et LES, ce qui fournit un nombre important de combinaisons imaginables à étudier. Les auteurs se sont principalement penchés pour l'instant sur l'utilisation de modèles RANS instationnaires du type Spalart-Allmaras à une équation [222], ou encore le modèle de fermeture classique $k - \epsilon$. Le modèle de sous-maille utilisé pour la LES est souvent le modèle de Smagorinsky (ou sa version dynamique). Plus rarement, d'autres modèles ont aussi été testés, comme Benarafa *et al.* [16] qui utilisent un modèle de sous-maille à fonction de structure sélective.

On trouve également dans la littérature des méthodes hybrides unifiées, qui utilisent un filtre unique pour traiter les deux domaines. On citera par exemple l'approche DES (pour "Detached Eddy Simulation") introduite par Spalart *et al.* [223], ou encore le filtre hybride proposé par Germano [79] et récemment testé par Rajamani & Kim [191]. Ces méthodes unifiées sont très intéressantes car le traitement de la zone de communication entre les deux domaines est intrinsèque à la forme du filtre utilisé, ce qui facilite l'implémentation de la méthode, et la rend plus robuste car le nombre de degrés de liberté reste limité.

Sur le papier, les approches hybrides sont très intéressantes puisqu'elles permettent d'utiliser des modèles de turbulence complexes, en résolvant un écoulement tri-dimensionnel près de la paroi (ce que ne fait pas vraiment une méthode TBLE). En pratique, leur mise en oeuvre est bien plus délicate notamment à cause du traitement de l'interface entre les deux zones de calcul. La plupart des auteurs [180] ont ainsi constaté un comportement capricieux des approches hybrides au niveau de la région de raccord. Ce problème provient de la disparité entre les informations de la zone RANS et de la zone LES : les "tourbillons" éjectés de la zone RANS sont sous-résolus

par rapport aux attentes de la méthode LES, et vice versa. Plusieurs méthodes ont été testées pour corriger ce problème. Par exemple, la définition d'une zone de recouvrement entre les deux domaines dans laquelle une fonction de mélange est utilisée pour assurer la transition entre le modèle RANS et le modèle LES. Une autre méthode consiste à introduire un forçage stochastique au niveau de l'interface, afin d'introduire des perturbations qui viennent "casser les tourbillons" issus de la zone RANS et enrichir les informations fournies à la zone LES.

D'une façon générale, les approches hybrides sont surtout efficaces pour les écoulements sujets au phénomène de décollement, ou lorsque la courbure de la paroi varie fortement. En revanche, les résultats obtenus sur des écoulements simples (couche limite attachée, sur plaque plane) sont moins probants, et l'emploi d'une méthode de transition entre les deux domaines devient obligatoire. Les approches hybrides présentent donc des atouts intéressants, mais leur utilisation manque foncièrement de robustesse pour rejoindre l'étagère des modèles utilisables dans un code de calcul industriel. En effet, beaucoup de paramètres sont libres dans ces approches : leur mise en oeuvre ressemble à la réalisation d'une recette de cuisine, dont la réussite dépend du détail des ingrédients retenus. Le développement informatique de ces approches est aussi beaucoup plus compliqué que les méthodes concurrentes (lois de paroi et TBLE). Il faut en effet ajouter des tableaux de connectivité pour assurer la communication entre les deux domaines, et pour faciliter le traitement de la zone de transition. Cette méthode est donc destinée aux codes utilisant des grilles de calcul structurées, et donc pour des géométries relativement simples. Enfin, il est important de préciser que les approches hybrides sont plus coûteuses que les approches avec lois de paroi et TBLE, non seulement en termes de stockage des données (toutes les variables avancées dans la zone RANS doivent être mémorisées), mais aussi en termes de temps de restitution. A ce sujet, Piomelli [180] estime que le coût d'un calcul hybride RANS/LES évolue comme $\sim Re_\delta^{0.6} \ln Re_\delta$.

Afin de conclure cette présentation, on rappelle tout d'abord dans la table 1.7 les estimations de coût d'utilisation proposées par Piomelli [180]. Les lois de paroi sont nettement moins coûteuses que les méthodes TBLE ou hybrides. Pour cette raison, elles restent encore les plus utilisées dans les codes industriels. Ce fait est conforté par la table 1.8 qui récapitule les principales études s'intéressant à la modélisation des flux pariétaux pour des couches limites de référence. Ces études amont se concentrent principalement sur le comportement de la couche limite dynamique. Les tables 1.9 et 1.10 complètent cette récapitulation en regroupant les travaux intéressés par la modélisation des effets physiques complexes qu'on peut retrouver dans les tuyères des moteurs à propulsion solide. On voit là aussi que la majeure partie des études sont abordées avec des lois de paroi. Les rares travaux qui utilisent la méthode TBLE ou les approches hybrides essaient principalement d'améliorer la prédiction des flux pariétaux lorsque la couche limite est décollée sous l'influence d'un gradient de pression. De plus, parmi ces études, il semble que seules celles de Devesa [67] et Benarafa *et al.* [17] s'attaquent à la modélisation des couches limites thermiques. Le champ d'applications non-explorées par les modèles TBLE et hybrides est encore très vaste, ce qui laisse présager plusieurs travaux sur ces méthodes dans les années à venir.

approche	coût d'utilisation
couche limite résolue	$\sim Re_\delta^{2.4}$
lois de paroi	$\sim Re_\delta^{0.6}$
TBLE	$\sim 1.15 Re_\delta^{0.6}$
hybride (RANS/LES)	$\sim Re_\delta^{0.6} \ln Re_\delta$

Table 1.7 : Evolution du coût d'utilisation des différents modèles de paroi en fonction du nombre de Reynolds, Re_δ , de la configuration simulée, selon Piomelli [180]. Re_δ est basé sur l'épaisseur de la couche limite et sur la vitesse externe.

Références	Type de modélisation				Variables étudiées	
	corrélation	L.P.	TBLE	Hybride	vitesse	énergie
Idel'cik [100]	●	-	-	-	●	-
Kays <i>et al.</i> [114]	●	●	-	-	●	●
Clauser [49]	-	●	-	-	●	-
Coles [51]	-	●	-	-	●	-
Patankar & Spalding [225, 174]	-	●	-	-	●	-
Deardorff [62]	-	●	-	-	●	-
Schumann [207]	-	●	-	-	●	-
Grötzbach [84]	-	●	-	-	●	-
Piomelli <i>et al.</i> [182]	-	●	-	-	●	-
Balaras <i>et al.</i> [14]	-	-	●	-	●	-
Cabot & Moin [34]	-	●	●	-	●	-
Nikitin <i>et al.</i> [170]	-	-	-	●	●	-
Österlund <i>et al.</i> [173]	-	●	-	-	●	-
Marusic <i>et al.</i> [148]	-	●	-	-	●	-
Buschmann & Gad-el-Hak [32, 31, 33]	-	●	-	-	●	-
Piomelli & Balaras [181]	-	●	●	●	●	-
Temmerman <i>et al.</i> [238]	-	-	-	●	●	-
Mohammadi & Puigt [152]	-	●	-	-	●	-
Benarafa <i>et al.</i> [16]	-	●	●	●	●	-
Monkewitz <i>et al.</i> [156]	-	●	-	-	●	-
Kalitzin <i>et al.</i> [110]	-	●	-	-	●	-
Piomelli [180]	-	●	●	●	●	-

Table 1.8 : Liste non exhaustive des principaux travaux sur la modélisation des écoulements pariétaux de référence (simple effet de la turbulence). Les études sont classées suivant l'approche retenue pour la modélisation : corrélation, loi de paroi (L.P.), TBLE, ou hybride.

Caractéristique de l'écoulement	Références	Type de modélisation				Variables étudiées		
		corrél.	L.P.	TBLE	Hybride	vitesse	énergie	
nombre de Mach élevé	Keener & Hopkins [118]	●	-	-	-	●	-	
	So <i>et al.</i> [219]	●	●	-	-	●	-	
	Huang <i>et al.</i> [97, 98]	-	●	-	-	●	●	
	Dabireau [58]	-	●	-	-	●	●	
nombre de Prandtl	Sleicher & Rouse [215]	●	-	-	-	-	●	
	Kader [108]	-	●	-	-	-	●	
gradient de température	Petukhov [179]	●	-	-	-	●	●	
	Subramanian & Antonia [233]	-	●	-	-	●	●	
	Huang <i>et al.</i> [97]	-	●	-	-	●	●	
	Han & Reitz [88]	-	●	-	-	●	●	
	Craft <i>et al.</i> [56]	-	●	-	-	●	●	
	Dailey <i>et al.</i> [59]	-	●	-	-	●	●	
	Devesa [67]	-	●	●	-	●	●	
	Benarafa <i>et al.</i> [17]	-	●	●	-	●	●	
	gradient de pression	Huang & Bradshaw [96]	-	●	-	-	●	●
		Skote & Henningson [213, 214]	-	●	-	-	●	-
Shih <i>et al.</i> [211, 210, 209]		-	●	-	-	●	-	
Wang & Moin [250]		-	●	●	-	●	-	
Davidson & Peng [60]		-	-	-	●	●	-	
Nickels [164]		-	●	-	-	●	-	
Manhart <i>et al.</i> [143]		-	●	-	-	●	-	
Breuer <i>et al.</i> [25, 24]		-	●	-	●	●	-	
Monfort <i>et al.</i> [155]		-	-	●	-	●	-	
paroi rugueuse	Reshotko <i>et al.</i> [193]	●	-	-	-	●	●	
	Shih <i>et al.</i> [211]	-	●	-	-	●	-	
	Puigt [188]	-	●	-	-	●	●	
	Suga <i>et al.</i> [234]	-	●	-	-	●	●	
paroi transpirante	Stevenson [230, 231, 232]	-	●	-	-	●	-	
	Squire [228]	-	●	-	-	●	-	
	Simpson [212]	-	●	-	-	●	-	
	Piomelli <i>et al.</i> [182]	-	●	-	-	●	-	
	Mendez & Nicoud [150]	-	●	-	-	●	-	
écoulement réactif	-	-	-	-	-	-		
rayonnement	-	-	-	-	-	-		
ablation de la paroi	Air Force Lab. [4, 5, 6]	●	-	-	-	●	●	

Table 1.9 : Liste non exhaustive des principaux travaux sur la modélisation des écoulements pariétaux intégrant des **effets physiques complexes**. Les études sont classées suivant l'approche retenue pour la modélisation : corrélation, loi de paroi (L.P.), TBLE, ou hybride.

Références	phénomènes physiques étudiés	Variables étudiées	
		vitesse	énergie
Kader [109]	gradient de pression - gradient de température	●	●
Shih <i>et al.</i> [211]	gradient de pression - rugosité	●	-
Dabireau [58]	nombre de Mach élevé - gradient de température	●	●
Cal & Castillo [37]	gradient de pression - paroi transpirante	●	-
Craft <i>et al.</i> [54]	convection mixte (effet de flottabilité)	●	●
Desoutter <i>et al.</i> [65, 66]	écoulement sur film liquide pariétal évaporant	●	●

Table 1.10 : Liste non exhaustive des principaux travaux sur la modélisation des écoulements pariétaux **multi-physiques**, ou intégrant des effets **marginiaux**. Tous ces travaux utilisent une approche de modélisation par lois de paroi.

Enfin, on remarque dans les tables 1.9 et 1.10, le manque flagrant de modèles de paroi pour la prédiction des écoulements réactifs, soumis au rayonnement, ou s'écoulant sur une paroi ablatable. Au cours de ce travail de thèse, nous tenterons de progresser dans ces trois directions. On se concentrera exclusivement sur l'approche par lois de paroi.

1.3.3 Quelques mots sur la chaîne de calcul actuellement utilisée pour la conception des tuyères. Position de l'étude présente.

Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre du développement et de l'amélioration des outils de calcul à la disposition de Snecma Propulsion Solide pour la conception de leurs tuyères. Comme l'illustre la figure 1.18, plusieurs outils sont actuellement disponibles pour prédire les contraintes pariétales. La description de l'écoulement est assurée par un code qui résout les équations d'Euler¹⁵, assisté d'un second code de couche limite compressible bi-dimensionnelle (le code CLIC [11]). Du point de vue de la structure, un code thermo-mécanique s'occupe des déformations et des sollicitations thermiques de la tuyère. A l'interface entre ces deux modules intervient le programme THERMO (code SPS) qui est dédié à la prédiction du flux de chaleur et des flux d'espèces lorsque le matériau est sujet au phénomène d'ablation. Il est basé sur l'utilisation de corrélations empiriques, qui, à partir de quantités prélevées à l'extérieur de la couche limite (température T_∞ , composition chimique $Y_{k,\infty}$), de la température de paroi, de la pression dans la couche limite (supposée constante), et d'un schéma d'oxydation de surface, renvoie le flux de chaleur pariétal et les flux massiques de chaque atome à l'interface fluide/structure. A partir de ces derniers, on peut alors accéder à la vitesse d'injection pariétale, et à la vitesse de récession de la paroi. On trouvera dans la thèse de Bianchi [19] une description de ce type d'approche et son positionnement par rapport à des méthodes concurrentes.

¹⁵Equations de Navier-Stokes dans lesquelles on néglige les termes de diffusion moléculaire.

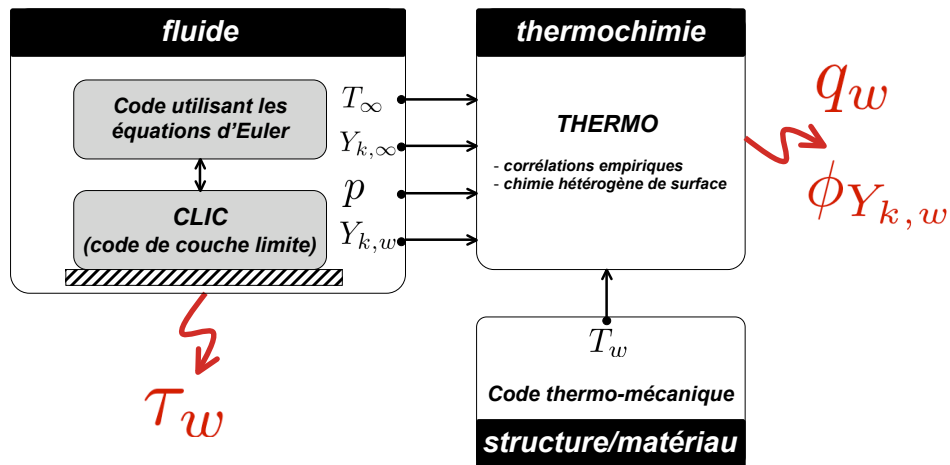


Figure 1.18 : Représentation simplifiée des différents outils de calcul utilisés actuellement par Snecma Propulsion Solide pour déterminer les flux pariétaux auxquels sont soumises les tuyères.

Snecma Propulsion Solide dispose ainsi d'un ensemble de programmes capables d'estimer les sollicitations aérothermochimiques auxquelles la tuyère doit résister. La figure 1.18 est bien entendu largement simplifiée, car on ne montre pas toutes les communications possibles entre les différents modules. Pour améliorer la prédiction, on pourra ainsi itérer plusieurs fois en échangeant des informations d'un module à l'autre. Cette opération rend le travail fastidieux, et manque de robustesse.

Afin de faire progresser ses méthodes de calcul, Snecma Propulsion Solide et l'ONERA envisagent une nouvelle approche. Elle consiste à unifier le module fluide et le module de thermochimie dans le code de calcul CEDRE développé par l'ONERA. Il s'agit d'un code Navier-Stokes, qui utilise aussi bien une approche RANS que LES pour traiter la turbulence d'un écoulement. L'objectif à terme est de résoudre dans un unique calcul l'ensemble du propulseur. On ne pourra donc pas s'offrir une résolution fine des couches limites, ce qui motive le développement de modèles de paroi. L'approche par loi de paroi étant l'option retenue, ce travail de thèse consiste à progresser dans ce sens, en tentant d'apporter de nouveaux éléments de modélisation.

La suite du document se divise en deux parties. La première est consacrée à la modélisation des écoulements sur une surface inerte, sans rugosité, à nombre de Mach faible. On y développe une loi de paroi pour les écoulements multi-espèces, à nombre de Prandtl non-unité, masse volumique variable, sous l'influence d'un gradient de température significatif (on discutera également la question des transferts radiatifs et du gradient de pression). Cette loi de paroi est tout d'abord validée *a priori*, puis testée *a posteriori* pour un écoulement mono-espèce. La seconde partie du manuscrit traite de la prise en compte de l'ablation des parois.

Première partie

Modélisation des flux pariétaux sur une tuyère à paroi inerte

CHAPITRE 2

Développement d'un modèle de paroi pour les écoulements réactifs à masse volumique variable et faible nombre de Mach.

Ce chapitre reprend les travaux réalisés pendant la thèse de L. Artal [9] et l'étend aux écoulements réactifs à faible nombre de Mach pour lesquels le gradient de température est significatif (la variation de la masse volumique doit être prise en compte). Dans un premier temps, on présente la génération de données de référence par simulation numérique directe, dans la configuration de canal-plan périodique. Les bilans de conservation des espèces, de la quantité de mouvement, et de l'énergie sont ensuite analysés ce qui permet de formuler des hypothèses sur la structure de l'écoulement. Des modèles sont proposés pour les termes turbulents, et validés par confrontation avec les données des simulations numériques directes. Finalement, un nouveau modèle de paroi est développé, et son efficacité vérifiée par des tests *a priori*.

L'ensemble de cette étude a été publiée dans le journal *Physics of Fluids*. Une reproduction de l'article est fournie ci-après.

article published in **Physics of Fluids**, 21, 055108 (2009)

Direct simulations for wall modeling of multicomponent reacting compressible turbulent flows

*Olivier Cabrit*¹

CERFACS,

*42 avenue Gaspard Coriolis,
31057 Toulouse, France*

Franck Nicoud

*Université Montpellier 2,
UMR CNRS 5149 / CC51,
Place Eugène Bataillon,
34095 Montpellier, France*

abstract

A study of multicomponent reacting channel flows with significant heat transfer and low Mach number has been performed using a set of direct and wall-resolved large eddy simulations. The Reynolds number based on the channel half-height and the mean friction velocity is $Re_\tau = 300$ for DNS, and $Re_\tau = 1000$ for wall-resolved LES. Two temperature ratios based on the mean centerline temperature, T_c , and the temperature at the wall, T_w , are investigated: $T_c/T_w = 1.1$ for DNS, and $T_c/T_w = 3$ for wall-resolved LES. The mass/momentum/energy balances are investigated, specially showing the changes induced by multicomponent terms of the Navier-Stokes equations. Concerning the flow dynamics, the data support the validity of the Van Driest transformation for compressible reacting flows. Concerning heat transfer, two multicomponent terms arise in the energy conservation balance: the laminar species diffusion which appears to be negligible in the turbulent core, and the turbulent flux of chemical enthalpy which cannot be neglected. The data also show that the mean composition of the mixture is at equilibrium state; a model for the turbulent flux of chemical enthalpy is then proposed and validated. Finally, models for the total shear stress and the total heat flux are formulated and integrated in the wall normal direction to retrieve an analytical law-of-the-wall. This wall model is tested favorably against the DNS/LES database.

¹Ph.D. student at Université Montpellier 2, olivier.cabrit@cerfacs.fr

2.1 Introduction

In many industrial applications, the thermodynamic conditions are severe so that momentum and energy transfers are strongly coupled. Foreseeing the near wall region behavior then becomes an issue because it is affected by the variations in fluid properties and physical effects usually not present in academic cases. For instance, the design of devices such as piston engines or rocket-motor nozzles requires the understanding and modeling of the multicomponent reacting compressible turbulent boundary layer. Classical wall models are clearly not appropriate for this flow configuration and their improvement is necessary. From a general point of view the physical effects leading to modeling issues can be listed as follows: compressibility (generated either by strong temperature gradients or high Mach number), wall heat transfer, streamwise pressure gradient, surface roughness, mass transfer at the wall (associated to blowing and suction effects), buoyancy, and chemical reactions. The present study focuses on the case when chemical reactions, wall heat transfer, and compressibility effects are present and potentially interact. Let's start by taking a look at a non-exhaustive overview of the historical and theoretical bases of the present study, distinguishing works that aim at improving the understanding of wall turbulence structure from those who deal with its modeling.

In his pioneer work [186], Prandtl is the first one who clarified the understanding of Navier-Stokes equations by neglecting inertia terms near the wall. He gave the name "*transition layer*" to what we now call the boundary layer. Blasius [21], von Kármán [247, 248], Clauser [49] and many others extended the boundary layer theory leading their studies to the derivation of the usual log-law formula for turbulent flows. Because this approximation is only justified for zero pressure gradient incompressible boundary layers, the need of taking care of others physical effects quickly arose. For instance, Patankar and Spalding [174] developed a set of formula that aimed at accounting for the modifications induced by pressure gradient and mass transfer through the wall. Concerning strong temperature gradients and Mach number effects, in the 1950's through the mid 1970's, many experimental studies focussed on the assessment of global quantities at the wall (friction coefficient, Nusselt number) and some empirical correlations of engineering interest were derived [215]. In the 1980's, the assessment of temperature profiles has received a major advance by the work of Kader [108] who derived an efficient correlation to account for Prandtl number effects. Despite these studies, the models used in design codes for industrial applications remained simple log-law type formulations even if some important physical effects were missing.

The compressible turbulent boundary layer with or without heat transfer is now well documented [75, 23, 227] and the advent of direct numerical simulations (DNS) [50, 99, 154, 158] and well-resolved large-eddy simulations (LES) [153, 246, 251, 59, 29] in the 1990's has provided reliable three-dimensional and time-dependent data to improve the investigation of wall-bounded compressible turbulent flows. Dealing with compressible effects implies to distinguish two types of density fluctuations: 1) the first one, generally associated with low Mach number flows, occurs from mean fluid-property variations (such as temperature or concentration); 2) the second

	Velocity	Velocity	Velocity
	-	Temperature	Temperature
	-	-	Chemistry
Low Mach number	Kim <i>et al.</i> [123] Moser <i>et al.</i> [161] Hoyas <i>et al.</i> [95] Jiménez <i>et al.</i> [106]	Cheng & Ng [46] Teitel & Antonia [237] Wang & Pletcher [251] Nicoud [166]	<i>no reference found</i>
High Mach number	Huang <i>et al.</i> [97] Zhang <i>et al.</i> [219]	Huang <i>et al.</i> [99] Coleman <i>et al.</i> [50] Morinishi <i>et al.</i> [158]	Martin & Candler [145, 146]

Table 2.1 : *Non-exhaustive overview of major studies found in the literature concerning the analysis of wall turbulence structure. References are classified according to the kind of equations implicated in the analysis.*

one arises from the compressible nature of the fluid, at high Mach number, when significant pressure fluctuations produces density variations. Nevertheless, in the study of wall-bounded compressible turbulent flows it is well accepted that compressibility effects are mainly due to mean fluid-property variations [159]. This convenient assumption, referred to as Morkovin hypothesis, allows to investigate the compressible turbulent boundary layer in the same line of the incompressible one by paying attention to the effects of mean density variations. The use of the Van Driest transformation [242] for the modeling of compressible flows is thus supported by this hypothesis, even at high Mach number. Experimental [118, 76, 97, 219] and numerical [98, 251, 166, 158] studies have shown the accuracy of the Van Driest transformation in scaling the velocity profile with wall heat transfer and/or high Mach number flows.

The case of reacting flows where chemistry can modify the wall turbulence structure has received little attention in the literature. Martin and Candler [145, 146] were the first, and to the authors's knowledge the only ones, who performed a DNS of hypersonic reacting boundary layer. Their studies focus on the feedback mechanism between chemistry and turbulence: exothermic reactions provide energy to the turbulent motion while the reaction rate is increased by the turbulent temperature fluctuations. As a consequence, exothermic reactions increase the magnitude of turbulent fluctuations while the effect of endothermic ones appears to be the opposite. Despite this recent work, the understanding of near-wall turbulence structure suffers from a lack of data relevant to reacting wall bounded-flows. This is emphasized by Table 2.1 that briefly summaries the major studies available in the literature.

Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) and LES methods are now widely used for the development and design of engineering devices. Wall models are often preferred in industrial cal-

culations since they allow to reduce the computation demand drastically. Note also that using wall models together with high-Reynolds number formulations usually leads to more stable computations than the low Reynolds number approaches where regions with small viscosity and stiff gradient must be handled [152]. The price to pay is the development of wall functions for the assessment of the mass/momentum/energy fluxes at the solid boundaries knowing the outer flow conditions at the first off-wall grid points. Note that for RANS calculations, additional prescription is necessary to insure a coherent behavior of the turbulence model transport equations in the near wall region (the specific case of k - ϵ turbulence model will be discussed further, in the last section of this paper).

The logarithmic structure of the overlap region of the turbulent boundary layer is now well supported by many studies [173, 31, 33, 61] and the classical log law is thus implemented in most of the RANS/LES codes. It provides good results for simple incompressible flows but the trend today is to generalize the wall function approach [211, 56, 209, 32, 241] to account for more physics. Most of the improved models deal with streamwise pressure gradient effects [96, 213, 214, 209, 164, 94], wall roughness [211, 234], compressibility [219, 167], heat transfer [88], mass transfer [212, 167], or even buoyancy effects [56], but a lack of data explains the poor advances made for reacting flows (see Table 2.2). Moreover, generalized models often make use of artificial integration or curve-fit techniques to make the integration of equations possible [88, 56] which means that they are only well suited to the applications they are derived for. It is the authors point of view that robust and accurate models can/should be developed by simplifying and integrating the basic flow equations. Such modeling effort must be supported by the analysis of detailed relevant data. Classical experimental techniques cannot provide the required space resolution for flows involving strong temperature gradients and chemical reactions. An alternative is to rely on DNS and wall-resolved LES to generate precise and detailed data set of generic turbulent flows under realistic operating conditions.

The purpose of the current paper is to extend the panel of the existing studies on incompressible and compressible turbulent boundary layer to the general case of wall-bounded reacting flows. The basis of our work is a set of DNS and wall-resolved LES of low Mach number periodic reacting channel flows with either small or large temperature gradients. The main objectives of the present study are:

- 1) generate relevant reference data in the general case of multicomponent reacting compressible turbulent boundary layer;
- 2) use this database to analyze momentum and energy balances;
- 3) illustrate how these balances can be used to improve the existing wall models and account for more physics in the wall heat flux assessment.

The paper is arranged as follows. Section 2.2 presents the governing equations of reacting flows, a short description of the numerical method, the flow parameters and the description of the

Wall modeling issues	References	Model discussed		
		velocity	temperature	turbulence
Prandtl number effect	Kader [108]	-	●	-
wall mass transfer	Simpson [212]	●	-	-
	Nicoud & Bradshaw [167]	●	-	-
compressibility (STG)	Subranian & Antonia [233]	●	●	-
	Han & Reitz [88]	●	●	-
	Nicoud & Bradshaw [167]	●	-	-
	Dailey <i>et al.</i> [59]	●	●	-
compressibility (MNE)	Huang & Coleman. [98]	●	●	-
	So <i>et al.</i> [219]	●	-	-
surface roughness	Shih <i>et al.</i> [211]	●	-	-
	Suga <i>et al.</i> [234]	●	●	-
streamwise pressure gradient	Huang & Bradshaw [96]	●	-	-
	Skote & Henningson [213, 214]	●	-	-
	Shih <i>et al.</i> [209]	●	-	-
	Nickels [164]	●	-	-
	Houra & Nagano [94]	●	●	-
complex flows/mixed effects	Craft <i>et al.</i> [56, 55, 54]	●	●	●
chemical reactions	<i>no reference found</i>	-	-	-

Table 2.2 : Non-exhaustive list of main references found in the literature dealing with improved wall modeling. In this table, STG referred to strong temperature gradient, MNE to Mach number effect, and symbols indicate whether this type of equation is discussed (●) or not (-) in the corresponding reference.

simulations. Section 2.3 provides the analysis of the mass/momentum/energy balances in order to establish the quality of the results and to underline the prevalent physical mechanisms. Section 2.4 illustrates how the database can be used to develop and improve existing wall models following a generic approach. Finally, Sec. 2.5 summarizes the results of this study.

2.2 Equations and numerical strategy

2.2.1 Governing equations

The conservation equations for three-dimensional, compressible, turbulent flows of reacting gaseous mixture are well-known and available in several text books [131, 183]. Continuity equation (2.1), mass species conservation (2.2), momentum conservation (2.3), total non-chemical energy conservation (2.4) and perfect gas equation of state (2.5) can be written with Einstein notation (summation on i, j and l subscripted variables) in the following form:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho(u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \mathcal{S}_i \quad (2.3)$$

$$\rho \frac{DE}{Dt} = -\frac{\partial q_i^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i}(p u_i) + \dot{\omega}_T + \mathcal{Q} + u_i \mathcal{S}_i \quad (2.4)$$

$$\frac{p}{\rho} = r T \quad (2.5)$$

with τ_{ij} the viscous shear stress tensor and q_i the molecular heat flux (different from q_i^* that represents the sensible enthalpy flux) respectively given by:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.6)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_k h_{s,k} Y_k V_{k,i}}_{q_i^*} + \rho \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k V_{k,i} \quad (2.7)$$

The notations used in this paper are the following: i subscripted quantities refer to variables dependent on directions \vec{x} , \vec{y} and \vec{z} (for multiple summation, subscript i is replaced by either j or l); subscript k refers to k^{th} species; for any quantity f , $Df/Dt = \partial f/\partial t + u_i \partial f/\partial x_i$; u_i is the velocity vector whose components are noted u , v and w in the cartesian coordinate system; p is the thermodynamic pressure; T the temperature; ρ the density of the fluid; Y_k and X_k denotes the mass and molar fractions of species k respectively, with $Y_k = X_k W_k/W$; W_k the atomic weight of species k ; $W = \sum_k X_k W_k$ the mean molecular weight of the mixture; $r = R/W$ the perfect gas constant per mass unit with R the perfect gas constant per mole; $V_{k,i}$ the diffusion velocity of species k in i -direction; $\dot{\omega}_k$ the mass reaction rate of species k ; $\dot{\omega}_T = -\sum_k \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k$ is the heat release with $\Delta h_{f,k}^0$ the chemical enthalpy of formation per unit mass of species k (note that when one considers the conservation equation for temperature instead of Eq. (2.4), the reaction source term not only involves the formation enthalpy but also the sensible one; this could be confusing since this term is also called “heat release” in the literature whereas its definition is different [183]); S_i the momentum source term acting in the i -direction and \mathcal{Q} the energy volume source term (see Sec. 2.2.3 where the values retained for these source terms are specified); $C_{p,k}$ the heat capacity at constant pressure of species k ; $C_p = \sum_k C_{p,k} Y_k$ and C_v the heat capacity at constant pressure and constant volume of the mixture, respectively; μ and $\nu = \mu/\rho$ are the dynamic and the kinematic viscosity, respectively; λ the heat diffusion coefficient of the fluid; the possible variables to represent enthalpy for one species are the sensible enthalpy $h_{s,k} = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT$ or the specific enthalpy, $h_k = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT + \Delta h_{f,k}^0$ (sum of the sensible and the chemical parts), defined with a reference temperature $T_0 = 0K$ for this work; the possible variables to represent the enthalpy of the mixture are the sensible enthalpy $h_s = \sum_k h_{s,k} Y_k$, the specific enthalpy $h = h_s + \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k$, the total enthalpy $h_t = h + u_i u_i/2$ or the total non chemical enthalpy $H = h_s + u_i u_i/2$; by analogy, e_s , e , e_t and E denote the sensible, specific, total and total non chemical energies, respectively (one recalls that p/ρ is the difference between enthalpy and energy, whatever the form retained is).

The derivation of the system of equations (2.1-2.7) is performed under the following assumptions:

- no external forces,
- effects of volume viscosity are null,
- no Dufour effect for the heat flux,
- radiation heat transfer is negligible.

The latter statement seems questionable regarding the high temperatures and strong temperature variations involved in this study (see Table 2.4). However, the study of Amaya et al. [7] has demonstrated that the changes introduced by the radiative source term in such configurations do not have an incidence upon the turbulence structure of the flow. This means that taking into account the radiative effects or not will lead to the same wall model development. Besides, it appears that for a periodic turbulent channel flow configuration such as case B of the present work (see Table 2.4 and Table 2.5), neglecting radiative heat transfer only fathers a relative error of 7% in the prediction of the total wall heat flux.

Temperature [K]	Compressibility factor
1050 <i>K</i>	1.02
2750 <i>K</i>	1.009
3000 <i>K</i>	1.008

Table 2.3 : Compressibility factor of the simulated mixture computed with the Peng-Robinson equation of state. Results obtained for three characteristic temperatures of the present study.

Moreover, even if the density can vary in the computation, the buoyancy effects are neglected for two main reasons. First, it is often necessary to separate different physical effects in order to improve understanding of their fundamentals. Neglecting the buoyancy effects allows us to focus on the proper density effects. Second, an estimation of the ratio Gr/Re^2 (Gr being the Grashof number) sustains this assumption. Indeed, with a moderate Reynolds number ($Re = 5000$), a relative density ratio $\Delta\rho/\rho_w = 0.67$ (maximum value taken in the wall-resolved LES), and a kinematic viscosity of order $\nu \approx 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$, we find that $Gr/Re^2 \approx 2630h^3$ (h is the reference length, e.g. the channel half-height in this study). Thus, the parameter Gr/Re^2 is smaller than 5% (much less than the value 0.3 advocated by Sparrow *et al.* [226] for the critical limit between forced convection and mixed flows) as long as h is smaller than 0.026 meters. This means that the no-buoyancy body force assumption is justified whether the characteristic length scale is of order 2 *cm* or less. This would be a reasonable range for a true experiment, for instance based on a subscale solid rocket motor designed to measure heat fluxes [169]. For the present simulations, this condition is also verified as the channel half-height never exceeds 0.2 *mm*.

Note concerning the approximation of perfect gas equation of state

Because the mean temperature and pressure of the mixture are very high in this study (around 3000 *K* and 10 *MPa*, respectively) the validity of the perfect gas equation of state, Eq.(2.5), is also questionable. Indeed, if these operating conditions are close to the critical point or near the pseudo-boiling line, the classical perfect gas equation of state should be modified to take into account attractive and repulsive intermolecular forces [184]. Hence, in order to support the usability of Eq.(2.5), the Peng-Robinson equation of state [175] has been used to compute the compressibility factor, $Z = P\mathcal{V}/RT$ where \mathcal{V} is the molar volume of the mixture. As presented in Table 2.3, Z stays very close to unity for the three tested temperatures. This indicates that replacing Eq.(2.5) by a real gas equation of state (such as the Peng-Robinson one [175]) should not have any major repercussions on the thermodynamics of the flow. Moreover, the goal of this study is to develop a wall model that gives reliable predictions in the most common cases (the perfect gas assumption is valid for 95% of industrial applications); the use of a real gas equation of state is thus out of the scope of this work.

2.2.2 Modeling of the transport terms

When external forces acting on the species are neglected, the exact expression of the diffusion velocity is reduced to:

$$V_{k,i} = \underbrace{-\sum_l D_{kl} \frac{\partial X_l}{\partial x_i}}_{\text{mixture effect}} - \underbrace{\sum_l D_{kl} (X_l - Y_l) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{pressure gradient effect}} - \underbrace{\sum_l D_{kl} \chi_l \frac{\partial \ln T}{\partial x_i}}_{\text{Soret effect}} \quad (2.8)$$

where D_{kl} are the multicomponent diffusion coefficients of the diffusion matrix and χ_l the thermal diffusion ratio of species l . Solving the transport system Eq. (2.8) is an expensive task for CFD codes and this is why the system is simplified in the present study. First of all, the pressure gradient effect is neglected because for a periodic channel flow configuration the pressure variations stay weak. The Soret effect is also neglected and the simplification of Eq. (2.8) is achieved by the use of the Hirschfelder and Curtiss approximation [92] with correction velocity. As mentioned by Giovangigli [80] this is the best first-order accuracy model for estimating diffusion velocities of a multicomponent mixture. It consists in replacing the rigorous mixture effect part of the diffusion velocity system by a simpler one:

$$V_{k,i}^{hc} X_k = -\mathcal{D}_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.9)$$

where the $V_{k,i}^{hc}$ denotes the Hirschfelder and Curtiss diffusion velocity, and \mathcal{D}_k an equivalent diffusion coefficient of species k into the rest of the mixture. The latter coefficient is built from the binary diffusion coefficients $\mathcal{D}_{ij}^{\text{bin}}$ which can be assessed from the gas kinetic theory [80]:

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / \mathcal{D}_{jk}^{\text{bin}}} \quad (2.10)$$

Mass conservation is a specific issue when dealing with reacting flows. To insure that the system of equations satisfies the two constraints $\sum_k Y_k = 1$ and $\sum_k Y_k V_{k,i} = 0$, a correction velocity V_i^{cor} is added to the Hirschfelder and Curtiss diffusion velocity $V_{k,i}^{hc}$. At each time step, the correction velocity is computed as:

$$V_i^{cor} = \sum_k \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

so that the diffusion velocities for each species k :

$$V_{k,i} = V_{k,i}^{hc} + V_i^{cor} \quad (2.12)$$

satisfy the constrain $\sum_k Y_k V_{k,i} = 0$. Combined with the assumption of constant Schmidt numbers, the Hirschfelder and Curtiss approximation is very convenient because the equivalent diffusion coefficients can be easily related to the kinematic viscosity according to: $\mathcal{D}_k = \nu / Sc_k$. The problem is then efficiently closed by imposing the Schmidt numbers and it is not necessary to

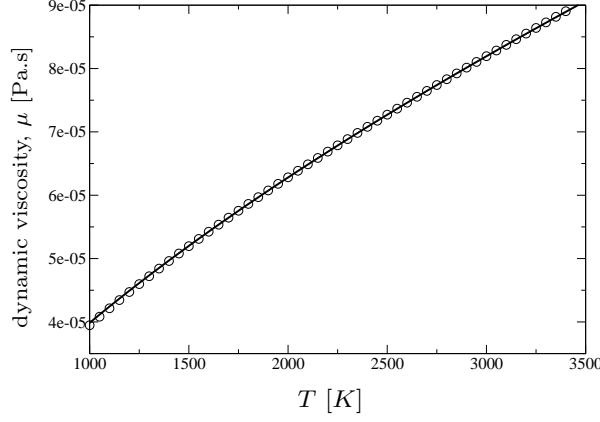


Figure 2.1 : Dynamic viscosity of the simulated mixture as a function of temperature. \circ : computed with EGLIB library; — : power-law Eq. (2.13).

compute the D_{ij}^{bin} coefficients which are complex functions of collision integrals and thermodynamics variables. Note that in the present work, the dynamic viscosity is modeled by a power-law expression:

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^c \quad (2.13)$$

where $\mu_{ref} = 8.194 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$, $T_{ref} = 3000 \text{ K}$ and $c = 0.656$. This choice is supported by Fig. 2.1 that presents the difference between the retained model and the dynamic viscosity of the simulated mixture computed with EGLIB library [70, 71]. This plot argues that a Sutherland type formulation is not necessary for the temperature range covered in this study.

2.2.3 Set up of the simulations

In order to cover different kinds of turbulent wall-bounded flows and to isolate some physical processes such as chemical reactions or strong temperature gradients, four different periodic channel flows have been computed. Their physical characteristics are summarized in Table 2.4 in which Re_τ is the target friction Reynolds number, Re_c the Reynolds number based on the channel half-height (denoted by h in this paper) and centerline properties, and Re_b the Reynolds number based on bulk quantities (i.e. the bulk density $\rho_b = 1/h \int_0^h \bar{\rho} dy$, bulk velocity $u_b = 1/h \int_0^h \bar{\rho} u dy / \rho_b$, and viscosity at the wall). Note that case A is the reference case for this study because this is the one that includes less physical effects: the temperature gradient is small and no chemical reaction is activated.

Figure 2.2 shows the reference coordinate system, and the notation used to describe the computational domain. Periodic boundary conditions are applied in the homogeneous streamwise (\vec{x})

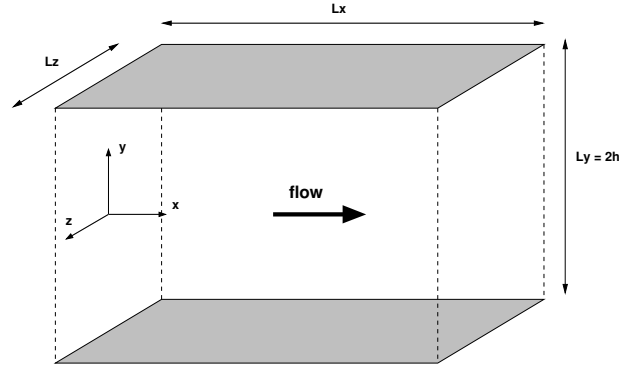


Figure 2.2 : Sketch of a computational domain.

case	Re_τ	Re_c	Re_b	Mach	T_w	T_c/T_w	chemistry
A	300	4400	4130	0.2	2750K	1.1	off
B	300	4460	4160	0.2	2750K	1.1	activated
C	1000	5080	10090	0.2	1050K	3	off
D	1000	5190	10150	0.2	1050K	3	activated

Table 2.4 : Physical parameters of the simulated cases. In this table, T_w and T_c are the temperature respectively at the wall and at the centerline, and the Mach number is the maximum value evaluated with local properties.

and spanwise (\bar{z}) directions while the temperature at the walls is imposed by an isothermal boundary condition. The pressure gradient that drives the flow and compensates for viscous dissipation is enforced by adding a space and time constant source term in the streamwise direction. Hence, the momentum source term \mathcal{S}_i of Eq. (2.3) and Eq. (2.4) is null in the wall normal and spanwise directions but takes a constant value, noted \mathcal{S}_x , in the streamwise direction.

In addition, a source term, noted \mathcal{Q} , that warms the fluid in volume is added to the energy equation (2.4) in order to drive the mean temperature of the wall-bounded flow to the desired value T_{mean} . At each time step, a space constant value of \mathcal{Q} is adjusted dynamically according to:

$$\mathcal{Q}^{t+1} = \rho_{av} C_{v,av} \frac{T_{mean} - \frac{1}{V} \iiint_{\Omega} T^t dV}{\tau_{relax}} \quad (2.14)$$

where subscript “ av ” denotes an averaged quantity integrated over space and time variables, \mathcal{Q}^{t+1} the energy source term at time $t + \Delta t$, Ω the computational domain and V its volume, T^t the temperature at time t , and τ_{relax} a relaxation time coefficient set in the present study to $\tau_{relax} = 0.3h/u_\tau$.

case	type of simulation	$n_x \times n_y \times n_z$	L_x/h	L_z/h	Δx^+	Δz^+	Δy_w^+	Δy_c^+	t/τ_{diff}
A	DNS	$31 \times 159 \times 39$	3.14	1.25	29	9	0.8	6	25
B	DNS	$31 \times 159 \times 39$	3.14	1.25	29	9	0.8	6	25
C	wall-resolved LES	$44 \times 159 \times 44$	3.5	1.3	81	30	1.4	30	14
D	wall-resolved LES	$44 \times 159 \times 44$	3.5	1.3	81	30	1.4	30	14

Table 2.5 : Numerical parameters of the simulations.

Domain size and spatial resolution

The original Kim, Moin and Moser [123] channel calculation was at low Reynolds number, $Re_\tau = 180$. One recalls that $Re_\tau = hu_\tau/\nu_w$, h being the channel half-height, $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho_w}$ the friction velocity and ν_w the kinematic viscosity at the wall. Several studies [161, 95] have later shown that it was necessary to simulate channel flows in wider boxes to account for turbulent structures of high Reynolds number and to expect a sufficiently large log layer. Hence, a minimal target value of $Re_\tau = 300$ has been used in the present work. Other parameters relevant to the numerical resolution are summarized in Table 2.5. For each DNS case, this table presents: the type of the simulation; the number of grid points $n_x \times n_y \times n_z$ (all the simulations were carried out with hexahedral elements); the streamwise and spanwise length of the domain scaled by the channel half-height; Δx^+ and Δz^+ , the x and z constant grid spacing scaled by the viscous length $y_\tau = \nu_w/u_\tau$; Δy_w^+ and Δy_c^+ , the minimum and maximum grid spacing in viscous wall units, respectively at the wall and at the center of the channel (the grid is stretched in the wall normal direction); the computational time period t scaled by the characteristic diffusion time, $\tau_{\text{diff}} = h/u_\tau$.

The values of the length of the computational box and the number of grid points seem to be very small compared to the recent simulation of Hoyas and Jiménez [95]. However, the goal here is not to provide the “exact” high-order turbulence statistics but rather to represent zeroth order effects of the density variation and chemistry on the turbulent profiles: concerning the box size, the domain has been built to be about twice wider than the minimal unit flow conditions defined by Jiménez and Moin [105]; concerning the grid spacing, a particular attention has been given to the wall normal refinement (first off-wall grid point situated at $y^+ \approx 1$) and the constant streamwise and spanwise spacing has been set to a typical value.

An indication of the numerical fidelity of the calculations is given by the streamwise and spanwise two-point correlations from the channel centerline and near the walls, shown in Fig. 2.3 for case A. These results are similar to those found from cases B, C and D. The correlation coefficients should drop to zero if the computational domain were large enough to allow the use of periodic conditions in the homogeneous directions. Except for the pressure two-point correlation near the centerline region, the domain size appears to be wide enough. In fact, the pressure stay

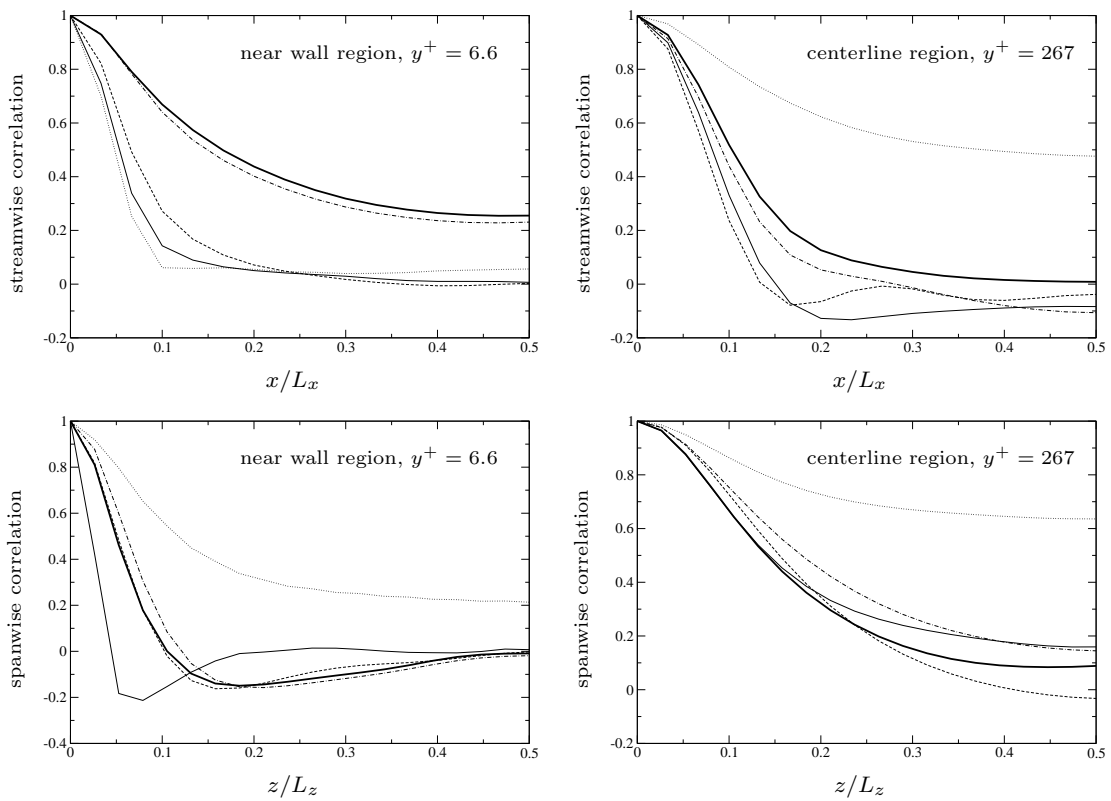


Figure 2.3 : Two-point correlations in streamwise and spanwise directions for case A. — : u ;
 - - - : v ; - - - : w ; - · - : T ; ····· : p .

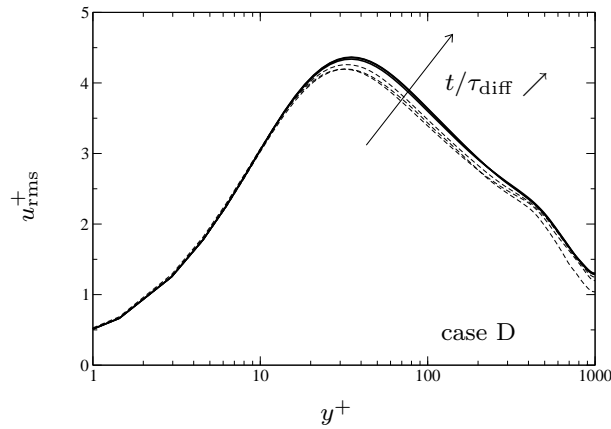


Figure 2.4 : Time convergence of the root-mean-square streamwise velocity in wall units (results are similar for case C). $-\cdot-\cdot-$: $t/\tau_{diff} < 10$ (three profiles are plotted namely, $t/\tau_{diff} = 1, 5, 8$); $—$: $t/\tau_{diff} > 10$ (four profiles are plotted namely, $t/\tau_{diff} = 11, 12, 13, 14$).

correlated because of the acoustic waves that can travel along the “infinitely” long channel without being damped. Note however that the two-point correlation of the streamwise velocity goes to zero as expected, meaning that the acoustic fluctuations are not large enough to modify the turbulent statistics. This behavior has also been reported by Coleman *et al.* [50].

Moreover, the time convergence of the statistics has been verified looking at the time evolution of the root-mean-square streamwise velocity profile, a first-order statistics. This result is shown in Fig. 2.4 for case D, case for which the assimilation time period is the shortest (the time convergence of the statistics is less questionable for cases A and B because their assimilation period is longer). This plot demonstrates the proper convergence of the statistics for $t/\tau_{diff} > 10$.

Simulated mixture

The mixture retained for the simulations is composed of seven species: H_2 , H , H_2O , OH , CO_2 , CO and N_2 . These species have been selected because they are typical of many industrial applications and they offer a large range of molar weight and thermo-physical properties, thus promoting the multispecies effects. Usual values of transport properties, such as Schmidt and Prandtl numbers, are determined using the EGLIB library [70, 71] and summarized in Table 2.6. Note that in this study, the Prandtl number of the mixture is equal to 0.47 which differs from the classical value 0.7 for air. Hence, the classical wall models for temperature specially developed for air flow configuration will not be efficient in the present DNS. For this reason, and because the main objective is to build a reliable model which would not be limited to a unique Prandtl number value, it will be shown in Sec. 2.4 how the Prandtl number dependance can be included into the model.

Pr	Sc_{H_2}	Sc_H	Sc_{H_2O}	Sc_{OH}	Sc_{CO_2}	Sc_{CO}	Sc_{N_2}
0.47	0.2	0.15	0.65	0.54	0.98	0.86	0.87

Table 2.6 : Transport coefficients of the simulated mixture.

Moreover, this equivalent mixture needs a reliable kinetic scheme which reproduces the concentration changes of each species during the simulations. Hence, in the framework of Maxwellian production rates [80], $\dot{\omega}_k$ the mass reaction rate of species k produced by R reactions is written:

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_{r=1}^R (\nu_{k,r}^b - \nu_{k,r}^f) Q_r \quad (2.15)$$

where $\nu_{k,r}^f$ and $\nu_{k,r}^b$ are the forward and backward stoichiometric coefficients of the species k in reaction r , respectively, and Q_r the molar progress rate of reaction r . For the general case, this rate of progress Q_r is usually given by:

$$Q_r = \gamma_M \left(K_r^f \prod_k \gamma_k^{\nu_{k,r}^f} - K_r^b \prod_k \gamma_k^{\nu_{k,r}^b} \right) \quad (2.16)$$

where $\gamma_k = \rho Y_k / W_k$ is the molar concentration of species k . For three-body reactions $\gamma_M = \sum_k \alpha_{k,r} \gamma_k$ is the molar concentration of the equivalent third body M with $\alpha_{k,r}$ the third-body efficiency of species k in reaction r (when no third body is involved in the reaction $\gamma_M = 1$ by default). K_r^f and K_r^b denotes the forward and backward rate constants of reaction r , respectively. In this study, the forward rate constants are approximated by an Arrhenius formulation:

$$K_r^f = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.17)$$

where A is the pre-exponential constant, β the temperature exponent, and E_a the activation energy. The backward rate constants are evaluated through the equilibrium constants, $K_r^e = K_r^f / K_r^b$, which could be assessed from classical theory [131]. Thereby, a kinetic scheme based on seven chemical reactions has been tuned using the GRI-Mech elementary equations (URL: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech). Details of the retained scheme are presented in Table 2.7. It has been validated verifying that this reduced scheme implemented in the code is able to predict the right chemical equilibrium composition given by the EQUIL library of CHEMKIN (software developed at Sandia National Laboratories for solving complex chemical kinetics problems) and the whole set of species involved in GRI-Mech chemical reaction mechanism.

2.2.4 Numerical solver

DNS/LES were performed with the AVBP solver developed at CERFACS. This parallel code offers the capability to handle unstructured or structured grids in order to solve the full 3D com-

Reaction	A [cgs units]	β	E_a [cal/mole]	$\alpha_{k,r}$
$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.00E+18	-1.0	0.	$\alpha_{H_2} = \alpha_{H_2O} = 0.0$
$2H + H_2 \rightleftharpoons 2H_2$	9.00E+16	-0.6	0.	-
$2H + H_2O \rightleftharpoons H_2 + H_2O$	6.00E+19	-1.25	0.	-
$2H + CO_2 \rightleftharpoons H_2 + CO_2$	5.50E+20	-2.0	0.	-
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.20E+22	-2.0	0.	$\alpha_{H_2} = 0.73; \alpha_{H_2O} = 3.65$
$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.16E+08	1.51	3430.	-
$OH + CO \rightleftharpoons H + CO_2$	4.76E+07	1.228	70.	-

Table 2.7 : Chemical kinetic scheme retained for this study. The first and fifth reactions involve an abstract third body, denoted by M . For these reactions the third-body efficiencies are set by default to $\alpha_{k,r} = 1.0$ for all the species, except for the ones given in the table.

pressible reacting Navier-Stokes equations with a cell-vertex formulation. During the past years, its efficiency and accuracy have been widely demonstrated in both LES and DNS for different flow configurations [162, 204, 151].

A centered Galerkin finite element method with a three-step Runge-Kutta temporal integration method has been used in the present study to solve the flow equations described above. This numerical scheme is fourth order accurate in space, third order accurate in time, and thus compatible with the grid resolution used (see Table 2.5) to provide reliable statistics of the flow. The efficiency of this numerical method has been successfully tested by Colin & Rudgyard [52].

Finally, the subgrid-scale stress model applied for wall-resolved LES is the WALE (Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) model [168] specially developed for this kind of wall-bounded flows. It is notably able to recover the proper y^3 damping scaling for eddy viscosity at the wall.

2.3 DNS results

The forthcoming sections present the profiles obtained after a statistical treatment has been applied to the simulation results. It consists in performing averages over the homogeneous directions (\vec{x} and \vec{z}) and time (the integration time is given in Table 2.5). This averaging process implies that any partial derivative of a variable f in the wall normal direction is equivalent to a total derivative, i.e. $\partial f / \partial y \equiv df / dy$. Let us introduce the notations used in the equations that follow: either $\bar{\cdot}$ or $\langle \cdot \rangle$ for the ensemble average; either $\tilde{\cdot}$ or $\{ \cdot \}$ for the Favre average defined for a variable f as $\{f\} = \langle \rho f \rangle / \langle \rho \rangle$; the single prime, $'$, and the double prime, $''$, represent the turbulent fluctuations with respect to Reynolds and Favre averages respectively.

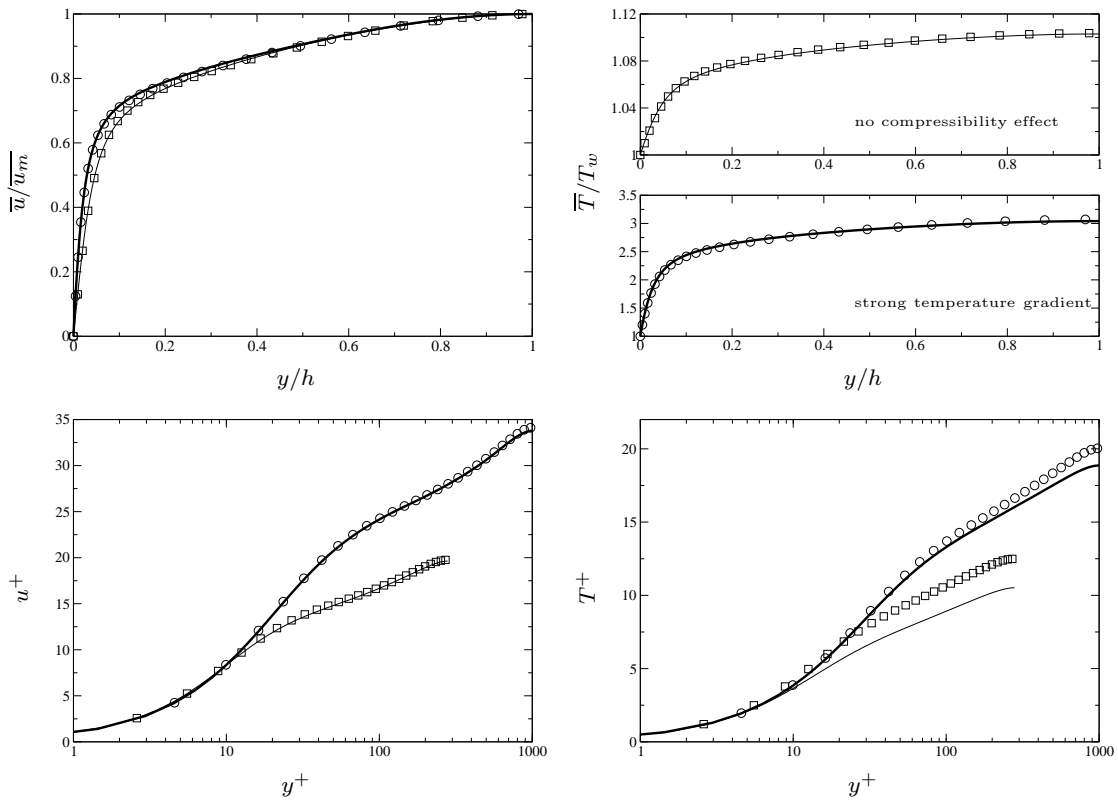


Figure 2.5 : Effect of chemical reactions and strong temperature gradient on mean velocity and temperature profiles. \square : case A (no chemistry); — : case B; \circ : case C (no chemistry); — : case D.

A wall model allows to predict wall quantities such as the shear stress, τ_w , and the heat flux, q_w , from the knowledge of the flow quantities far from the wall. Typically, these two parameters are functions of velocity and temperature but in the context of multicomponent reacting flows, the mixture composition dependence has to be included in wall models. This is emphasized by Fig. 2.5 that depicts the differences induced by chemical reactions and a significant temperature gradient on mean velocity and temperature profiles. On the top row of this figure, the velocity is scaled by the maximum velocity at the centerline, \overline{u}_m , and the mean temperature by the temperature at the wall, T_w (note that because the present study makes use of isothermal walls, one has $T_w \equiv \overline{T}_w$ as well as $\mu_w \equiv \overline{\mu}_w$; this equivalence does not stand for other variables at the wall). On the bottom row, profiles are shown in the standard wall unit scaling: $u^+ = \overline{u}/u_\tau$ and $y^+ = yu_\tau/\overline{\nu}_w$ with $u_\tau = \sqrt{\overline{\tau}_w/\overline{\rho}_w}$, and $T^+ = (T_w - \overline{T})/T_\tau$ with $T_\tau = \overline{q}_w/(\overline{\rho}_w \overline{C}_{p,w} u_\tau)$. This figure clearly shows the coupling existing between velocity, temperature, and chemistry. Concerning u^+ profiles, chemistry has a negligible influence and the only visible discrepancies are due to density variations (related to strong temperature gradient). Concerning T^+ profiles (representing the temperature profile scaled by the wall heat flux), the discrepancies observed for the four simulated cases indicate that the wall heat flux is both sensitive to chemistry and strong temperature gradient, and that none of these two effects can be neglected compared to the other one. In other words, even if chemical reactions do not seem to have an influence on the mean velocity and temperatures profiles (top row of Fig. 2.5), they actually have an important effect on the fluxes at the wall. This justifies the need of taking care of fluid heterogeneity in wall models. Hence, the coupled wall functions derived should have the form of a system of two equations $\tau_w = \tau_w(u, T, Y_k)$ and $q_w = q_w(u, T, Y_k)$.

First of all, the quality of the simulations and the efficiency of the averaging procedure will be tested by verifying that the balance of each conservation equation is well closed. The study of species mass fraction/momentum/energy balances will then help in understanding the behavior of reacting compressible turbulent wall-bounded flows, investigating which terms could be neglected in the turbulent momentum/energy transfers for developing a new wall model. For clarity reasons and because this study mostly focusses on multicomponent/chemistry effects, results from cases B and D will be mainly shown in what follows.

2.3.1 Species mass fraction balances

The averaging procedure for equation (2.2) leads to the following expression:

$$\frac{d(\overline{\rho} \widetilde{vY}_k)}{dy} + \frac{d(\overline{\rho} \widetilde{V}_{k,y} Y_k)}{dy} = \overline{\dot{\omega}}_k \quad (2.18)$$

where the first left hand side (LHS) term can be assimilated to the divergence of the convective velocity field associated to species k , the second one to the divergence of the diffusion velocity field for the k^{th} species and the right hand side (RHS) term to the mean production rate of species

cases	$\overline{\dot{\omega}_{k,c}} / \overline{\dot{\omega}_{k,w}} $					
	H_2	H	H_2O	OH	CO_2	CO
B	-1.52%	1.6%	-1.7%	1.3%	-1.1%	1.1%
D	-12.7%	14.1%	-95.6%	97.0%	-19.7%	19.7%

Table 2.8 : Species production term at the centerline, $\overline{\dot{\omega}_{k,c}}$, scaled by the modulus of its wall value, $|\overline{\dot{\omega}_{k,w}}|$. Species N_2 is not shown because it is an inert species.

k . Figure 2.6 compares the influence of LHS and RHS terms of Eq. (2.18) for each species. The balances are well closed which indicates that the simulation is sufficiently time-converged and that the averaging time is long enough to proceed to an analysis of these balances (the maximum closure error is around 5% at the wall for species OH). Another good criterion to validate the quality of the DNS and of its post-processing is to check that the condition $\tilde{v} = 0$, resulting from the continuity equation (2.1) and the no-slip condition at the wall, is well satisfied. This is shown in Fig. 2.7 that presents the Favre and Reynolds averaged wall normal convective velocity profiles scaled by the friction velocity: the maximum error observed on \tilde{v}^+ closure is around 0.01% for case B and 0.05% for case D, whereas the maximum value of \tilde{v}^+ is around 0.6% for case B and 6.5% for case D. Hence, because $\tilde{v} = 0$, any Favre averaged correlation of type $\tilde{v}f$ between v and any scalar f can equivalently be written as $\tilde{v}''f''$. This is not the case for Reynolds averaged correlations since $\bar{v} \neq 0$ because of the density variations.

Figure 2.6 suggests that the production term $\overline{\dot{\omega}_k}$ is mainly important in the region $y/h < 0.2$ which indicates a strong activity of chemical reactions in the near wall region. It seems that the species production is null at the center of the channel in Fig. 2.6 but this is merely due to the graph scale effect. Indeed, Table 2.8 illustrates that the production term is not null at the centerline in both cases attesting that the effect of chemistry is present in the whole boundary layer.

Concerning the LHS terms, it is clear that neither one nor the other dominates the process of species conservation, whatever the species is. However, looking at the wall normal convective velocity (Fig. 2.7), the diffusion velocities (Fig. 2.11 and Fig. 2.12) and the species mass fractions (Fig. 2.9 and Fig. 2.10), two asymptotic regimes can be observed. In the fully turbulent region ($y/h > 0.2$), diffusion velocities vanish because gradients of species concentration asymptotically tend to zero. The behavior of the wall normal convective velocity is different: the gradient of \bar{v} tend to a constant value. This explains why the species mass fraction conservation is mainly led by the divergence of the wall normal convective flux in the fully turbulent region. In the vicinity of the wall ($y^+ < 10$) the opposite is observed: the gradients of diffusion velocities are sharper than the one of the mean convective velocity and for this reason the mechanism of mass conservation tend to be led by species diffusion. We can summarize this analysis saying that the effect of species diffusion is important near the wall and lowered in the turbulent region. One thus expect that the contribution of species diffusion is negligible in the turbulent part, which will be confirmed in the

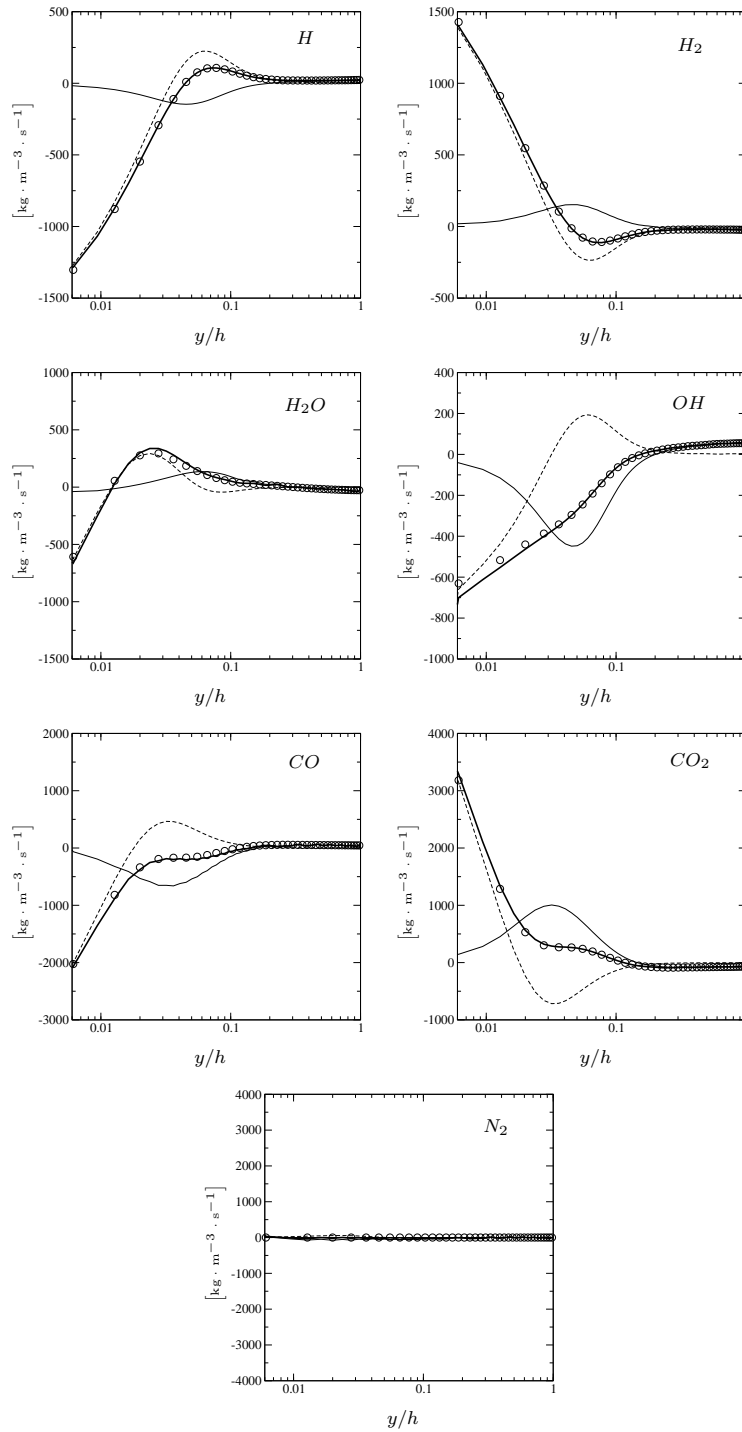


Figure 2.6 : Species mass fraction balances of case B (results for case D are not strictly identical but stay coherent with the analysis presented herein). — : $d(\rho v \widetilde{Y}_k)/dy$; - - - : $d(\rho \widetilde{V}_{k,y} \widetilde{Y}_k)/dy$; — : $d(\rho(v \widetilde{Y}_k + \widetilde{V}_{k,y} \widetilde{Y}_k))/dy$; ○ : $\widetilde{\omega}_k$.

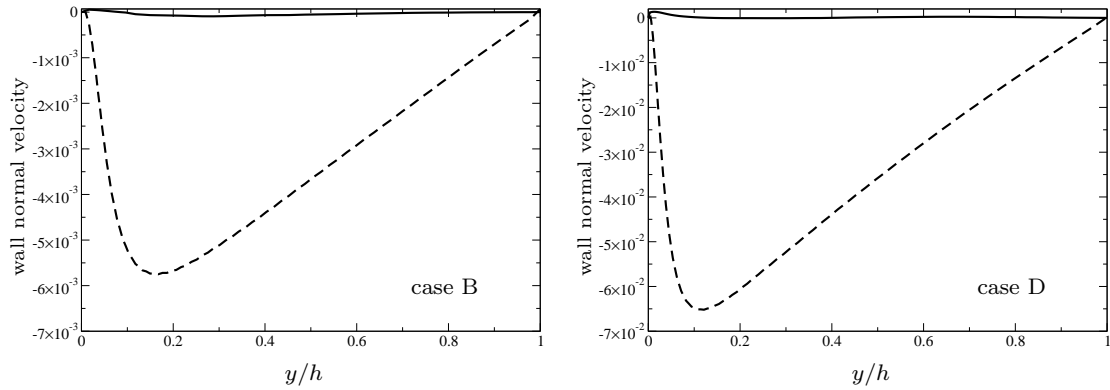


Figure 2.7 : Wall normal convective velocity profiles in wall units. Comparison between Reynolds and Favre averages. — : $\widetilde{v^+}$; - - - : $\overline{v^+}$.

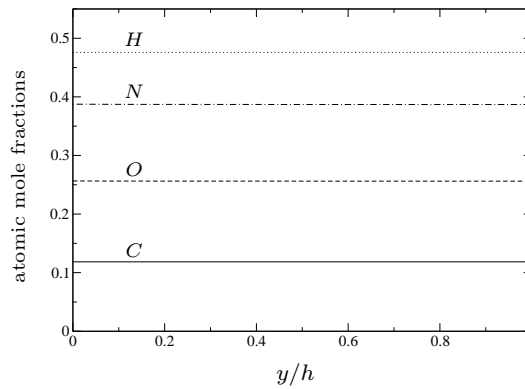


Figure 2.8 : Atomic composition of case B (profiles are identical for case D).

forthcoming sections.

Figure 2.8 shows that the conservation of mass is virtually done at constant atomic composition. A chemical equilibrium state depends on three parameters: the number of atoms available, the thermodynamic pressure, and the temperature. Because no wall normal variation of atomic composition is observed for the four atoms present in the mixture (C , H , O and N), the chemical equilibrium actually only depends on the temperature in the simulated turbulent boundary layer (one reminds that simulations of periodic channel flow are performed at constant thermodynamic pressure). This hypothesis has been successfully tested thanks to the EQUIL library of CHEMKIN software: equilibrium profiles that only depends on the temperature are generated by giving a unique mixture composition (here, the one at the centerline is chosen in order to be consistent with the wall model concept that uses variables taken in the outer part of the boundary layer) and the EQUIL solver is initialized by the mean temperature profiles of the simulations; the EQUIL

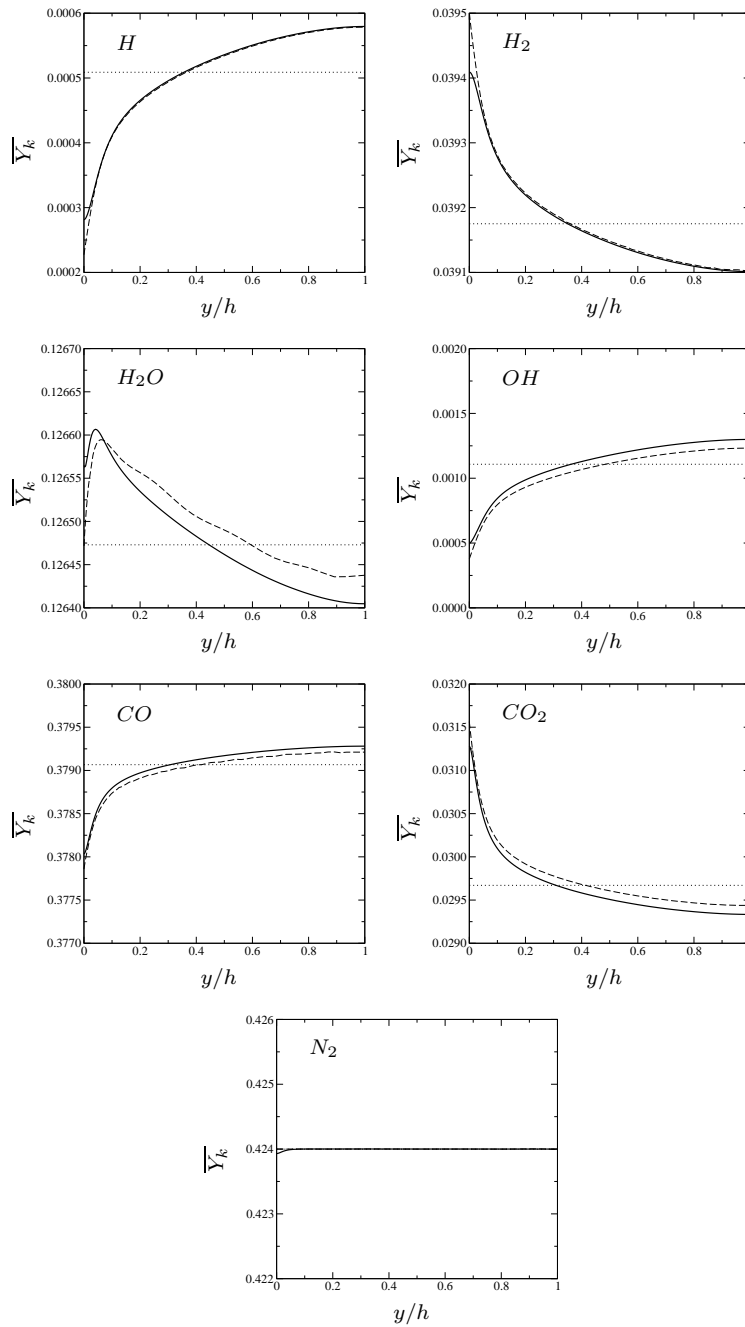


Figure 2.9 : Mass fraction profiles of cases A and B. \cdots : \bar{Y}_k , case A (no chemistry); — : \bar{Y}_k , case B; --- : $Y_k^{equil}(T)$, equilibrium state computed with the mean temperature profile of case B (results obtained from CHEMKIN software).

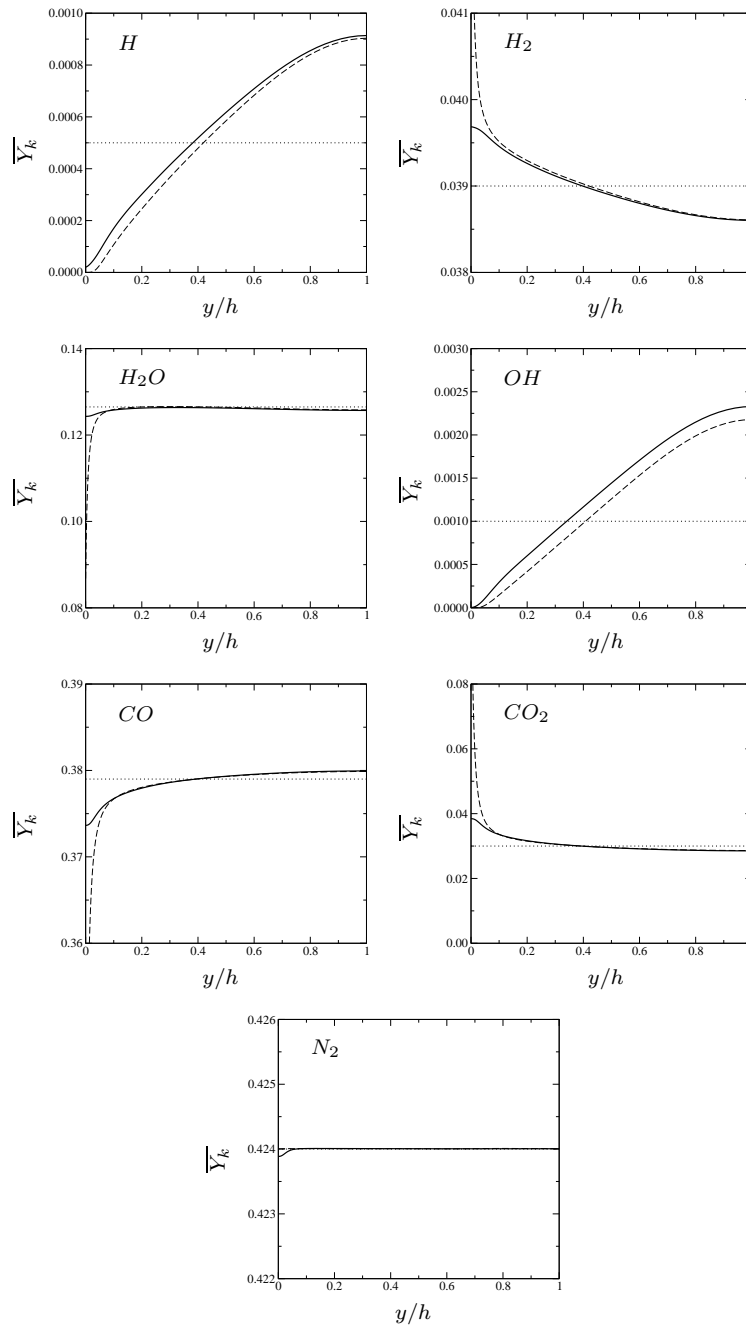


Figure 2.10 : Mass fraction profiles of the strong temperature gradient cases C and D. \cdots : Y_k , case C (no chemistry); — : Y_k , case D; --- : $Y_k^{equil}(T)$, equilibrium state computed with the mean temperature profile of case D (results obtained from CHEMKIN software).

library then rearranged the mixture composition solving a problem of the type “constant pressure and temperature”. Results are shown in Fig. 2.9 and Fig. 2.10 that demonstrate the validity of this hypothesis: $Y_k \approx Y_k^{equil} = Y_k^{equil}(T)$. One recalls that this condition is not imposed by the numerical resolution in the simulations since a chemical kinetic scheme composed of seven reactions is implemented in the code.

The profiles of the simulated cases and equilibrium state are not exactly similar at the wall which indicates that the characteristic time of diffusion tends to be shorter than the chemical characteristic time in this region. Moreover, the DNS/LES numerical solver imposes an impermeable boundary condition at the wall which is applied by imposing a null species flux in the wall normal direction, $\rho_w Y_{k,w} V_{k,y,w} = 0$. With the Hirschfelder and Curtiss approximation this implies:

$$\left. \frac{\partial X_k}{\partial y} \right|_w = 0 \quad (2.19)$$

a result visible on the DNS and LES profiles. Discrepancies on CHEMKIN profiles are observed in the vicinity of the wall ($y/h < 0.05$) because this impermeable boundary condition combined with the Hirschfelder and Curtiss approximation is not consistent with the chemical equilibrium assumption postulated above when the temperature gradient is not null. Indeed, making use of the equilibrium hypothesis, Eq. (2.19) can be rewritten as:

$$\left. \frac{dX_k}{dT} \right|_{eq} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_w = 0 \quad (2.20)$$

which is not verified by CHEMKIN because $dX_k/dT|_{eq} \neq 0$ and $\partial T/\partial y|_w \neq 0$. Note that if the Soret effect were accounted for to evaluate diffusion velocities, we would not have observed such an inconsistency at the wall. In this case another term arises in Eq. (2.19) and Eq. (2.20) so that $\rho_w Y_{k,w} V_{k,y,w} = 0$ does not imply $\partial X_k/\partial y|_w = 0$. However, differences between the two profiles remains small for each species and the chemical equilibrium hypothesis is well justified for 95% of the profile, notably in the turbulent region.

To evaluate the global behavior of the Hirschfelder and Curtiss model with correction velocity, $\overline{V_y^{hc}}$ of the simulations has been confronted in Fig. 2.11 and Fig. 2.12 to the effective diffusion velocities of the simulations, $\overline{V_{k,y}} = \overline{V_{k,y}^{hc}} + \overline{V_y^{cor}}$, and to the diffusion velocities obtained by solving the full system Eq. (2.8) thanks to a post-processing with the EGLIB library [70, 71] which solves the transport linear system with direct inversion. The latter are noted $\overline{V_{k,y}^{EGLIB}}$ and represent the reference data. Except for species H_2 and N_2 , we observe a very good agreement between the effective diffusion velocities of the simulations and the ones computed *a priori* with EGLIB. Moreover, comparing $\overline{V_{k,y}}$ and $\overline{V_{k,y}^{hc}}$ we see that the correction velocity modifies the Hirschfelder and Curtiss diffusion velocities, $\overline{V_{k,y}^{hc}}$, in the good direction. This is clearly visible looking at profiles of species H_2O , CO and CO_2 . Hence, the correction velocity is not intrusive for the computation and the model retained in the numerical solver to simulate mass diffusion is acceptable.

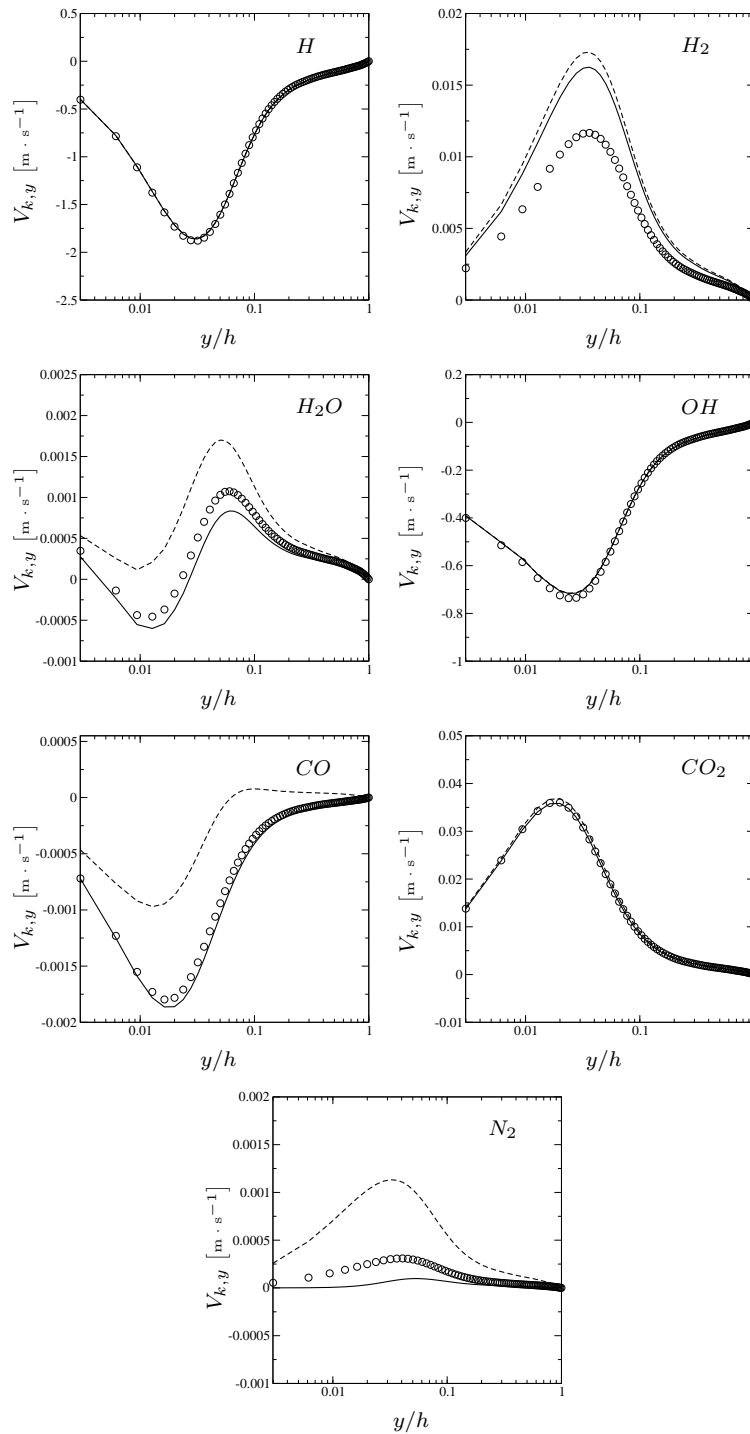


Figure 2.11 : Diffusion velocities of case B. $-----$: $\overline{V_{k,y}^{hc}}$; $————$: $\overline{V_{k,y}} = \overline{V_{k,y}^{hc}} + \overline{V_y^{cor}}$; \circ : $\overline{V_{k,y}^{EGLIB}}$.
 ($\overline{V_{k,y}^{hc}}$ and $\overline{V_{k,y}}$ perfectly collapse for species H and OH.)

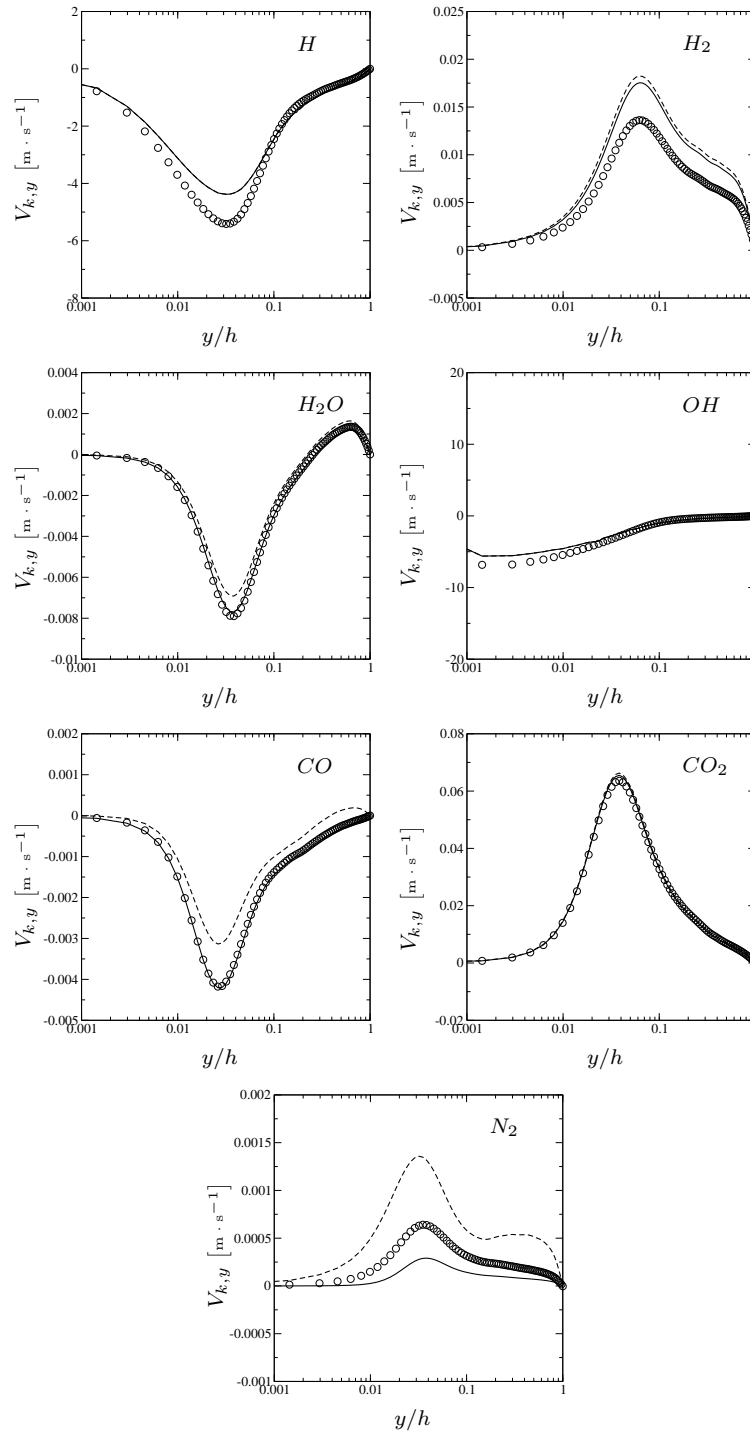


Figure 2.12 : Diffusion velocities of case D. $-\cdots-$: $\overline{V_{k,y}^{hc}}$; $—$: $\overline{V_{k,y}} = \overline{V_{k,y}^{hc}} + \overline{V_y^{cor}}$; \circ : $\overline{V_{k,y}^{EGLIB}}$.
 ($\overline{V_{k,y}^{hc}}$ and $\overline{V_{k,y}}$ perfectly collapse for species H and OH.)

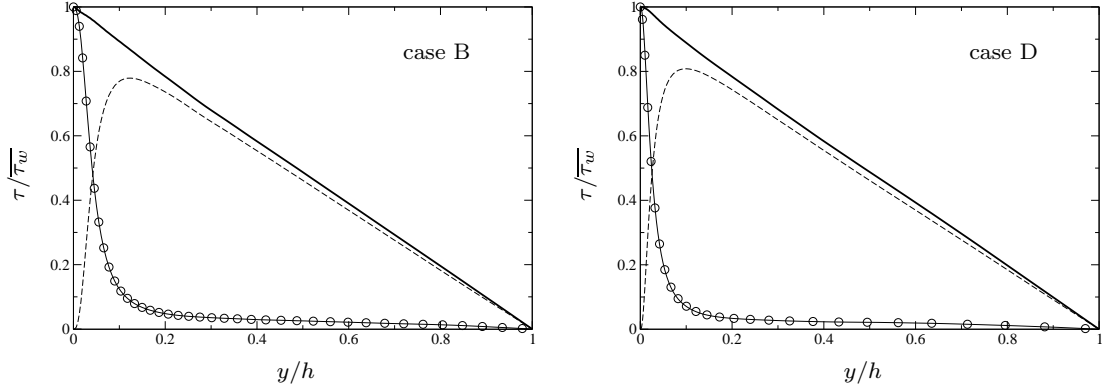


Figure 2.13 : Momentum conservation balance scaled by τ_w . — : laminar shear stress, $\overline{\mu \frac{du}{dy}}$; - - - : turbulent shear stress, $-\overline{\rho u'v''}$; — : Total shear stress, $\overline{\mu \frac{du}{dy}} - \overline{\rho u'v''}$; \circ : $\overline{\mu \frac{du}{dy}}$.

2.3.2 Momentum balance

Since the momentum conservation equation, Eq. (2.3), is not directly influenced by the mixture composition, the only possible changes induced by chemical reactions on the momentum balance arise indirectly from the coupling with the mass and energy equations. The average procedure applied to the equation for momentum conservation in the streamwise direction leads to the following reduced form:

$$\frac{d}{dy} \left(\overline{\mu \frac{du}{dy}} - \overline{\rho u'v''} \right) = -S_x \quad (2.21)$$

Figure 2.13 presents the integrated form of the latter equation which is equivalent to a balance of shear stress. The total shear stress is linear through the channel flow, the -1 slope being related to the imposed source term in the streamwise momentum equation. This illustrates that the feature predicted by Eq. (2.21) is well reproduced by numerical results, attesting that the data sample is large enough to compute realistic statistics. Since the streamwise momentum source term simulates a constant pressure gradient in the boundary layer, this slope would not exist if the flow were a zero pressure gradient one. Hence, the total shear stress would be constant all along the boundary layer. This comment will be fully discussed in the modeling section of this paper, Sec. 2.4.

Note also that in Fig. 2.13 the laminar shear stress refers to the term $\overline{\mu \frac{du}{dy}}$ which, strictly speaking, contains some turbulent contributions, $\overline{\mu' \frac{du'}{dy}}$. However, it is shown in the same figure that the latter turbulent term is negligible because the laminar shear stress is perfectly approximated by the relation $\overline{\mu \frac{du}{dy}}$. This classical result for boundary layer flows [99] is thus confirmed for the compressible reacting general case.

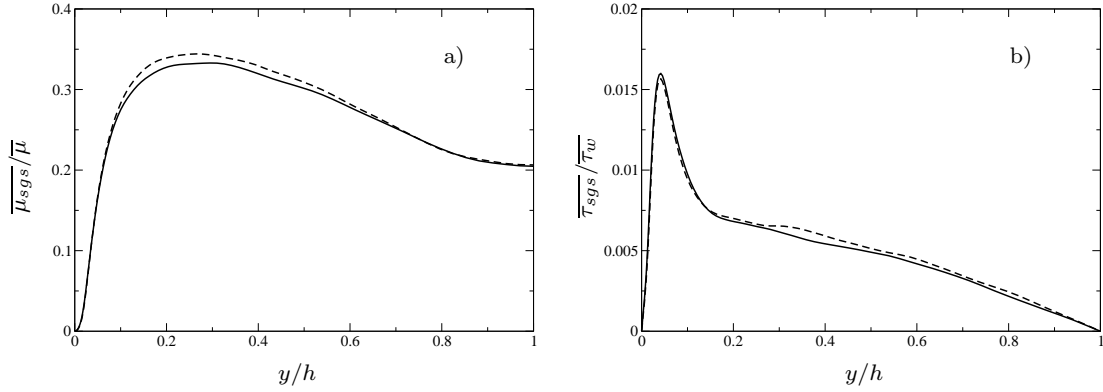


Figure 2.14 : Subgrid-scale contributions for LES cases C and D: a) subgrid dynamic viscosity, $\overline{\mu_{sgs}}$, scaled by its laminar value; b) subgrid shear stress, $\overline{\tau_{sgs}}$, scaled by the total wall shear stress. - - - : case C; — : case D.

As illustrated in Fig. 2.14, the contribution of the subgrid-scale model for LES cases C and D is negligible: $\overline{\mu_{sgs}}/\bar{\mu} \approx 0.3$ and $\overline{\tau_{sgs}}/\bar{\tau}_w$ never exceeds 1.6%. The subgrid shear stress is thus not shown in the momentum conservation balance Fig. 2.13. For the same reason, the subgrid terms will not be shown in the heat flux balances (Fig. 2.22 and Fig. 2.23).

2.3.3 Energy balance

In this section the specific enthalpy conservation equation (2.22) has been retained for practical reasons:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathcal{Q} \quad (2.22)$$

with summation on i and j -subscripted variables. After the statistical procedure has been applied, one obtains the following equation:

$$\frac{d}{dy} \left(\bar{\rho} \widetilde{v''h''} \right) = v \frac{dp}{dy} + \tau_{iy} \frac{du_i}{dy} - \frac{dq_y}{dy} + \bar{\mathcal{Q}} \quad (2.23)$$

Note that all the terms presented in Fig. 2.15 are voluntarily not fully decomposed for clarity and because the main goal here is to show that the balance is well closed. For instance, the specific enthalpy and the wall normal molecular heat flux could have been decomposed into $h = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k$ and $q_y = -\lambda \frac{dT}{dy} + \rho \sum_k h_k Y_k V_{k,y}$, respectively. Hence, the effects of chemistry on the energy conservation mechanisms are not explicitly visible in this balance, although they are present.

Figure 2.15 shows that the power of the pressure forces, $v \overline{dp/dy}$, is negligible in front of any other term. Moreover, the viscous effect term $\tau_{iy} du_i/dy$ (which is not the viscous heating,

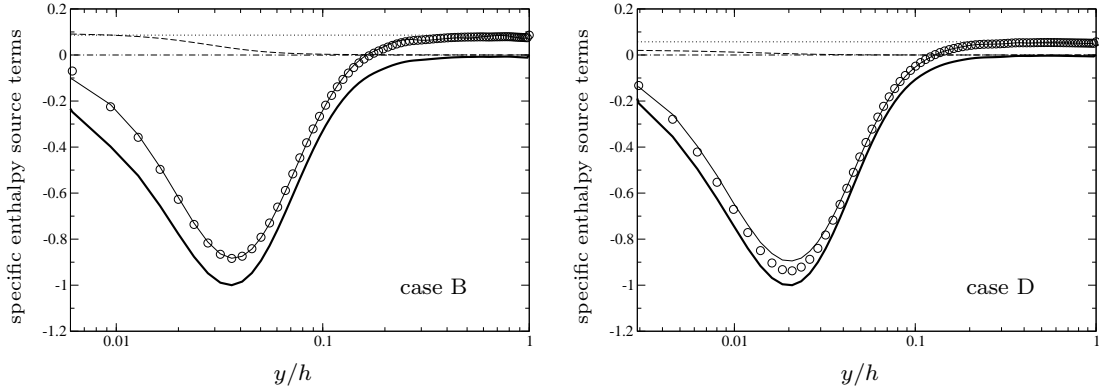


Figure 2.15 : Specific enthalpy balance scaled by $\left| \frac{dq_y}{dy} \right|_{max}$, for cases B and D. — : molecular diffusion, $-\frac{dq_y}{dy}$; : energy source term, \bar{Q} ; - - - : viscous term, $\tau_{iy} \frac{du_i}{dy}$; - · - : power of pressure forces, $v \frac{dp}{dy}$; ○ : total of RHS terms of Eq. (2.23); — : turbulent diffusion, $\frac{d}{dy} (\bar{\rho} \widetilde{v'' h''})$.

generally referred to as $d\overline{\tau_{iy}u_i}/dy$) is clearly negligible in the region $y/h > 0.05$ because the flow is at low Mach number. In the vicinity of the wall, the viscous effect is not strictly null but its contribution sharply vanishes in front of the molecular diffusion term. As a consequence, it is not necessary to include this term in a low Mach number wall model. Note also in Fig. 2.15 that the energy source term, \bar{Q} , is well constant as described in Sec. 2.2.

2.3.4 Comment on the Dufour effect

One recalls that the computations have been performed neglecting the Dufour part of the molecular heat flux, q_i . Indeed, if the Dufour effect were considered, Eq. (2.7) would have been replaced by the following one:

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{Fourier term}} + \rho \underbrace{\sum_k h_k Y_k V_{k,i}}_{\text{species diffusion}} + p \underbrace{\sum_k \chi_k V_{k,i}}_{\text{Dufour term}} \quad (2.24)$$

where χ_k are the species thermal diffusion ratios. To quantify the importance of the Dufour term in the simulations, the EGLIB library [70, 71] has been used to evaluate the thermal diffusion ratios and the Dufour part has been rebuilt *a priori* using the data of the DNS/LES for p and $V_{k,i}$. The resulting profile of the wall normal component of the Dufour term, $\overline{q_{y,Dufour}}$, has been plotted in Fig. 2.16 for cases B and D. This figure illustrates that the Dufour part of the molecular heat flux is negligible ($\overline{q_{y,Dufour}}$ does not exceeds 0.25% of the total heat flux at the wall for case B and 0.025% for case D) which confirms the assumption made to perform the simulations. Because

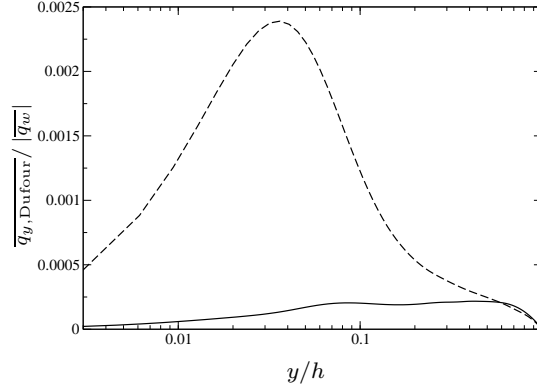


Figure 2.16 : Wall normal value of the Dufour heat flux computed a priori thanks to EGLIB library. Results are scaled by the total heat flux at the wall. - - - - : case B; — : case D.

the thermal diffusion ratios depends on the mixture composition, this conclusion stands for the present study but would be verified for any other mixture. However, the Dufour effect might be negligible for 95% of the applications.

The mass/momentum/energy balances have been investigated in this section, leading to first approximations concerning the conservation of energy (the power of pressure forces, the viscous effect terms and the Dufour effect are negligible). Following the idea of integrating the reacting Navier-Stokes equations in order to derive relevant expressions for the assessment of wall fluxes, it is shown in the forthcoming section how the remaining terms can be modeled.

2.4 Development of wall models

Starting from the general flow equations, one seeks for two independent equations of the type:

$$\frac{df}{dy} = F; \quad \frac{dg}{dy} = G \quad (2.25)$$

where f and g stand for the total flux of momentum and energy in the y -direction respectively. In their general formulation, the two functions f and g are dependent on the following set of variables: $(y, \tau_w, q_w, u_{out}, T_{out}, T_w, Y_{k,out}, Y_{k,w})$, where w -subscripted variables refer to wall quantities and out -subscripted ones refer to outer flow conditions. If F and G are simple functions of y , Eq. (2.25) can be integrated over space to generate a 2×2 non-linear system of equations with q_w and τ_w the unknowns. In other words, integrating Eq. (2.25) leads to a law-of-the-wall which can be used to assess the momentum and energy fluxes at the wall from the wall/outer flow conditions $(u_{out}, T_{out}, T_w, Y_{k,out}$ and $Y_{k,w})$. The simplest case would be $F = G = 0$ but the case $F = F_0$ and $G = G_0$ where F_0 and G_0 are constant values also leads to a suitable wall model.

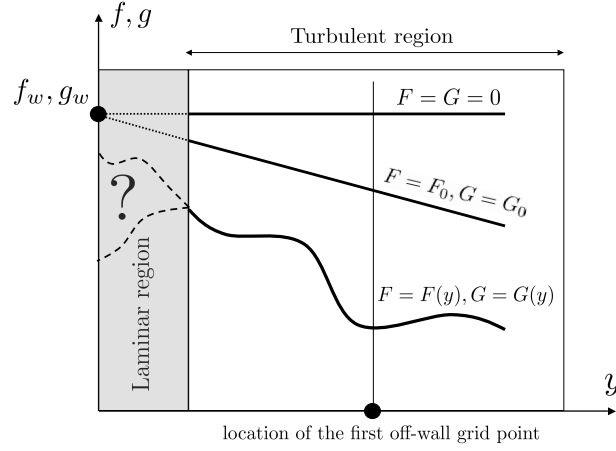


Figure 2.17 : Illustration of wall flux estimation knowing data from the first off-wall grid point located in the turbulent region (f represents the total shear stress, g the total heat flux).

On the contrary, if F and/or G are/is unknown function of y , Eq. (2.25) cannot be used to obtain a law-of-the-wall, as illustrated in Fig. 2.17.

The framework of this section follows five main assumptions for the flow: 1) the Reynolds number is infinite so that no wake function will be considered to describe the outer part of the boundary layer; 2) the Mach number is null; 3) no streamwise pressure gradients; 4) no blowing or suction at the wall surface; 5) no roughness effect.

2.4.1 Finding a function for the total shear stress

When we have analyzed the momentum balance (Sec. 2.3.2), we have seen that the laminar shear stress $\overline{\mu du/dy}$ is almost perfectly approximated by $\bar{\mu} d\bar{u}/dy$. The equation for the total shear stress thus takes the form:

$$\frac{d\overline{\tau_{tot}}}{dy} \approx \frac{d}{dy} \left(\bar{\mu} \frac{d\bar{u}}{dy} - \bar{\rho} \widetilde{u''v''} \right) = -\mathcal{S}_x \quad (2.26)$$

Note that with respect to the form of equation we are looking for, Eq. (2.25), F is not null as desired but is equal to a constant value, $-\mathcal{S}_x$. We have seen that this term was a pressure gradient like contribution to the momentum conservation which gives the slope for the total shear stress in Fig. 2.13. Since we seek for a wall model valid in the zero/small pressure gradient regime, this term is set to zero in what follows. The non-dimensionalized streamwise pressure gradient, $p_x^+ = (\nu_w/\rho_w u_\tau^2)(dp/dx)$, is equal to $p_x^+ = -1/Re_\tau$ for a periodic channel flow which implies that $p_x^+ \approx -0.003$ for cases A and B, and $p_x^+ \approx -0.001$ for cases C and D. As explained by

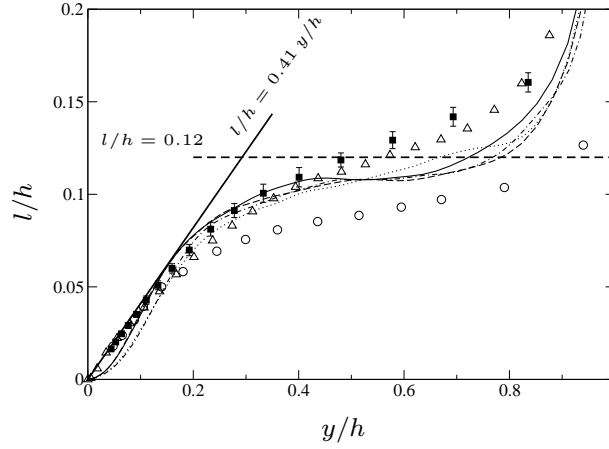


Figure 2.18 : Mixing-length, computed as $l = \left(-\widetilde{u''v''} \right)^{1/2} / (d\bar{u}/dy)$, scaled by the channel half-height. — · — : case A; ····· : case B; - - - - : case C; ——— : case D; \triangle : Hoyas and Jiménez [95], $Re_\tau = 2000$; \blacksquare : Österlund *et al.* [173], error bars representing a 95% confidence interval; \circ : Andersen *et al.* [8].

Nickels [164], this value is not strong enough to influence the behavior of the laminar and turbulent shear stresses (the pressure gradient should have an influence if $|p_x^+| > 0.005$). This justifies the development of wall model for zero streamwise pressure gradient from our database.

We thus recover the classical formulation:

$$\frac{d\overline{\tau_{tot}}}{dy} \approx \frac{d}{dy} \left(\bar{\mu} \frac{d\bar{u}}{dy} - \bar{\rho} \widetilde{u''v''} \right) = 0 \quad (2.27)$$

where the turbulent shear stress $-\bar{\rho} \widetilde{u''v''}$ can be approximated with the classical Boussinesq assumption combined with a Prandtl mixing-length model for the turbulent dynamic viscosity, μ_t . Hence, the turbulent shear stress can be modeled by:

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''v''} \approx \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy} \approx \bar{\rho} l^2 \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)^2 \quad (2.28)$$

where l denotes the mixing-length. For near wall flows, it has been shown that the mixing-length scales with the distance to the wall following the relation $l = \kappa y$, with κ the von Kármán constant whose value is usually assumed to be 0.41. This value has been criticized because some studies have shown that κ can change with the Reynolds number. This is not consistent with the classical log-law, $u^+ = 1/\kappa \ln y^+ + C$, which is not a function of Re . However, the experiments of Österlund *et al.* [173] have raised this confusion showing that the classical log-law formulation is no longer Re -dependent if κ is set to 0.38 and the additive constant, C , to 4.1 (this result has latter been confirmed by the study of Buschmann and Gad-el-Hak [31]). Nevertheless, the values

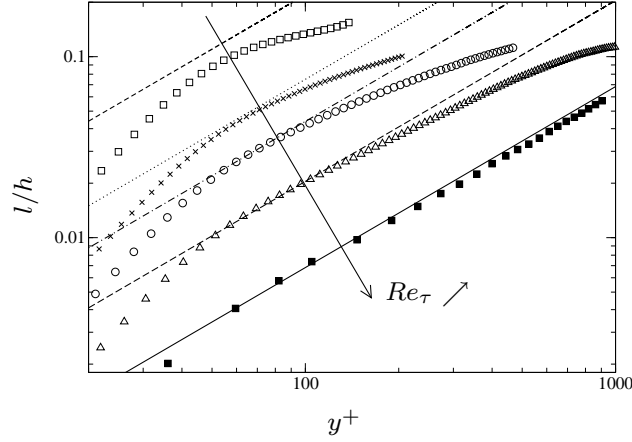


Figure 2.19 : Mixing-length scaled by the channel half-height as a function of y^+ . Symbols represent results from the DNS database of del Álamo *et al.* [63, 64] and Hoyas *et al.* [95] (URL: <http://torroja.dmt.upm.es/ftp/channels/>), and from measurements of Österlund *et al.* [173]. Straight lines refer to the classical scaling $l = \kappa y$ with $\kappa = 0.41$. (\square , - - -): Ref. [63], $Re_\tau = 180$; (\times ,): Ref. [63], $Re_\tau = 550$; (\circ , - · -): Ref. [64], $Re_\tau = 950$; (\triangle , - - -): Ref. [95], $Re_\tau = 2000$; (\blacksquare , —): experiments of Österlund *et al.* [173];

retained in this study for κ and C will remain the most classical ones, $\kappa = 0.41$ and $C = 5.5$ for wall-bounded flows ($C = 5.2$ for external boundary layer), mainly because this has little influence on the final prediction of u^+ . Indeed, a computation of the error $(u_O^+ - u_c^+)/u_c^+$, u_O^+ being the value advocated by Österlund *et al.* and u_c^+ the classical one, leads to an expression that depends on y^+ : $(u_O^+ - u_c^+)/u_c^+ = (0.19 \ln y^+ - 1.4)/(2.44 \ln y^+ + 5.5)$; the error does not exceed 5% for $50 < y^+ < 10^8$ (the two profiles are shown in Fig. 2.20 until $y^+ = 10^3$).

Figure 2.18 demonstrates the efficiency of the relation $l = \kappa y$. Results from cases A, B, C and D are confronted to the numerical result of Hoyas and Jiménez [95] as well as to the experimental measurements of Andersen *et al.* [8] and Österlund *et al.* [173]. As in the classical theory [114], we first note that the mixing length scales reasonably well with the channel half-height (or equivalently the boundary layer height for external flows) since all the profiles collapse. Moreover, our results are consistent with the ones of the high friction Reynolds number channel flow of Hoyas and Jiménez [95] and with the external boundary layer of Österlund *et al.* [173]. The profile of Andersen *et al.* [8] for zero pressure gradient shows some discrepancies with others profiles but the trend remains unchanged: the von Kármán constant reproduces the mixing-length fairly well up to $y/h \approx 0.2$, with or without chemical reactions and significant heat transfer. For $y/h > 0.2$, the mixing-length is no longer dependent on the distance from the wall and tends to a constant value ($l/h \approx 0.12$ from our simulations) which is also a classical result [114]. The sudden increase of l in the center region is due to $d\bar{u}/dy$ that tends to zero at the centerline.

Figure 2.19 shows the mixing length as a function of y^+ and illustrates that the collapse with the von Kármán model is enhanced when the Reynolds number increases. This supports the use of the relation $l = \kappa y$ for developing wall models which are designed to handle large Reynolds number flows. Moreover this figure demonstrates that when the friction Reynolds number is too weak, $Re_\tau = 180$ for instance, the simulation is not representative of an infinite Reynolds number boundary layer because the mixing length never matches with the von Kármán model. Hence, the higher the Re_τ of the simulation is, the better is the validation of the wall model with *a priori* tests.

Thus, the use of the von Kármán constant is justified to develop wall models. Integrating Eq. (2.27) over space, one obtains:

$$\overline{\tau_w} \approx \overline{\mu} \frac{d\overline{u}}{dy} + \overline{\rho} (\kappa y)^2 \left(\frac{d\overline{u}}{dy} \right)^2 \quad (2.29)$$

where the constant total shear stress $\overline{\tau_{tot}}$ has been replaced by its wall value $\overline{\tau_w}$ because Eq. (2.27) indicates that the total shear stress is constant throughout the wall region, i.e. $\overline{\tau_{tot}} \equiv \overline{\tau_w}$. Neglecting the laminar contribution, because in the context of wall modeling the first off-wall point has to be in the fully turbulent region, we finally recover the classical form:

$$\overline{\tau_w} \approx \overline{\rho} (\kappa y)^2 \left(\frac{d\overline{u}}{dy} \right)^2 \quad (2.30)$$

or equivalently in wall units:

$$\left(\frac{\overline{\rho}}{\overline{\rho_w}} \right)^{1/2} du^+ \approx \frac{dy^+}{\kappa y^+} \quad (2.31)$$

After integration, the latter equation leads to the well-known Van Driest transformation [242]:

$$u_{VD}^+ = \int_0^{u^+} \left(\frac{\overline{\rho}}{\overline{\rho_w}} \right)^{1/2} du^+ \approx \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.32)$$

The efficiency of this scaling has been mainly demonstrated for high Mach number flows [118, 97, 219, 98] (up to $Mach \approx 8$) and the case of significant heat transfer but low Mach number has received little attention by experimenters. However, since the transformation is based on the assumption that turbulence structure is unaltered by large temperature variations it should be as valid at low Mach numbers as at high ones. Indeed, Fig. 2.20 shows that the results of our simulations collapse quite well in the plane (y^+, u_{VD}^+) , supporting the usefulness of the Van Driest transformation to retrieve the classical logarithmic law of the wall in the case of strong temperature gradient ($T_c/T_w \approx 3$) and low Mach number, with or without chemical reactions. The collapse seems to be even better taking the values of κ and C proposed by Österlund *et al.* [173] but this should be confirmed with other experimental and numerical data.

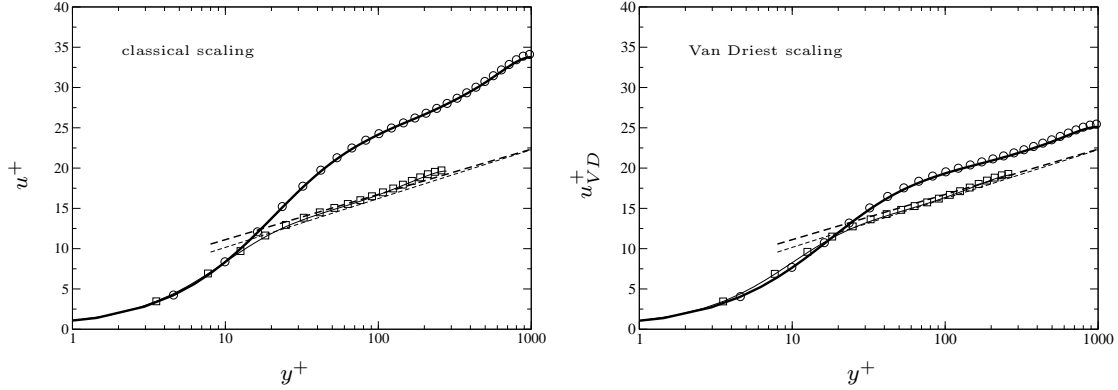


Figure 2.20 : Comparison between classical and Van Driest scaling for the mean streamwise velocity. \square : case A; — : case B; \circ : case C; — : case D; --- : standard law of the wall, $1/\kappa \ln y^+ + C$, with $\kappa = 0.41$ and $C = 5.5$; --- : law of the wall advocated by Österlund et al. [173], $\kappa = 0.38$ and $C = 4.1$.

2.4.2 Finding a function for the total heat flux

Finding a function similar to Eq. (2.25) for the total heat flux requires more attention when dealing with reacting flows. Indeed, the expression of G depends on the energy conservation equation considered. For instance, if the total non chemical energy equation (2.4) is chosen, we end up with:

$$\frac{d}{dy} (\overline{\rho v E} + \overline{q_y^*} - \overline{\tau_{yi} u_i} + \overline{p v}) = \overline{\dot{\omega}_T} + \overline{u} S_x + \overline{Q} \quad (2.33)$$

where the RHS terms are neither null nor equal to a constant value. This is shown in Fig. 2.21 where the heat release is compared to the contribution of the two source terms. We clearly see that even if the kinetic energy source term $\overline{u} S_x$ is negligible, the heat release $\overline{\dot{\omega}_T}$ is so strong near the wall that its contribution cannot be neglected. Moreover, since it is an unknown function of the distance to the wall, it cannot be integrated analytically. Hence, the derivation of the wall model cannot be achieved from the equation of total non chemical energy conservation.

Now considering the conservation of specific enthalpy, Eq. (2.22), one ends up with a more convenient expression because the heat release is no longer present as a source term and the following form is obtained:

$$\frac{d\overline{q_{tot}}}{dy} \approx \frac{d}{dy} \left(\overline{\rho} \overline{v'' h_s''} + \overline{\rho} \sum_k \overline{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0 - \lambda \frac{dT}{dy} + \overline{\rho} \sum_k \{h_k Y_k V_{k,y}\} \right) = \overline{Q} \quad (2.34)$$

where the power of pressure forces, $\overline{v dp/dy}$, and the viscous effects, $\overline{\tau_{iy} du_i/dy}$ have been neglected in agreement with the conclusions of Sec. 2.3.3. Moreover, neglecting the viscous effects

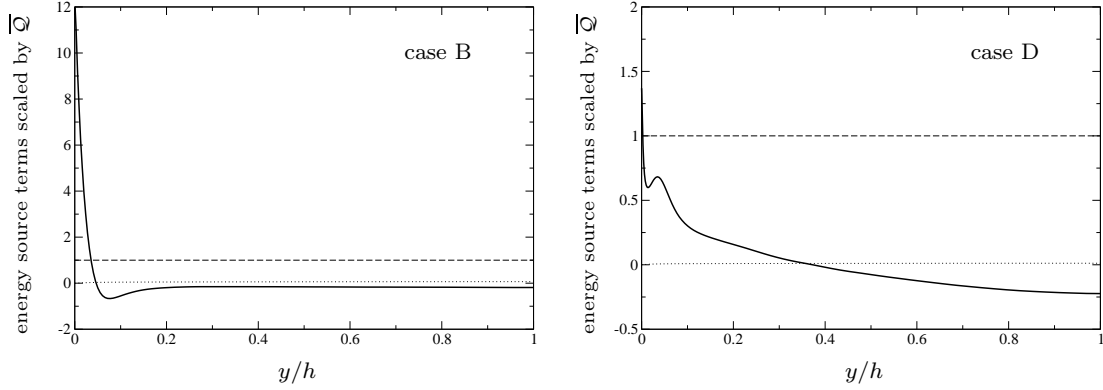


Figure 2.21 : RHS terms of Eq. 2.33 scaled by \overline{Q} . — : heat release, $\overline{\omega_T}$; : kinetic energy source term, $\overline{uS_x}$; - - - : volume energy source term, \overline{Q} .

is supported by the fact that we want to develop a wall model for low Mach number configurations. The viscous effect contribution is displayed in Fig. 2.22 together with all the other terms to demonstrate that it has no influence on the assessment of the total heat flux at the wall. Indeed, the fluxes that are not null at the wall are the Fourier flux and the viscous effect flux but the latter one is only a few percents of the total heat flux at the wall. In addition, the 1-slope (due to the energy source term \overline{Q}) is well recovered on the total heat flux which demonstrates the relevancy of the data sample. By analogy with the momentum source term S_x , this none physical term can be set to zero in the context of wall modeling because it is a constant volume source term that does not change the behavior of other heat flux terms (except giving them a slope). In a real boundary layer $\overline{Q} = 0$ (the total heat flux is constant) and the term G of the generic equation (2.25) is null. Note also that the species diffusion heat flux has no influence on the heat flux at the wall and quickly vanishes in the turbulent zone, $y/h > 0.2$. For the case where the temperature gradient is significant (case D), the contribution of this term to the total heat flux is strongly lowered. The species diffusion heat flux can thus be neglected for developing the wall model. In the turbulent region, the dominant term is the turbulent flux of sensible enthalpy, but the turbulent flux of chemical enthalpy cannot be neglected. Hence, the total heat flux is approximated in the boundary layer by the relation:

$$\overline{q_{tot}} \approx \overline{\rho v'' h''_s} + \overline{\rho \sum_k v'' Y''_k \Delta h_{f,k}^0} - \lambda \frac{dT}{dy} \quad (2.35)$$

We clearly see in Fig. 2.23 that neglecting the species diffusion is a good assumption because the total heat flux is still well modeled in the turbulent region by only considering the turbulent flux of specific enthalpy (sum of the sensible and chemical enthalpies). Note also that the Fourier heat flux, that contains the turbulent term $\overline{\lambda' dT'/dy}$, is perfectly approximated by the strictly laminar Fourier flux $\overline{\lambda dT/dy}$.

Two terms remains: the turbulent fluxes of sensible enthalpy and chemical enthalpy. The first

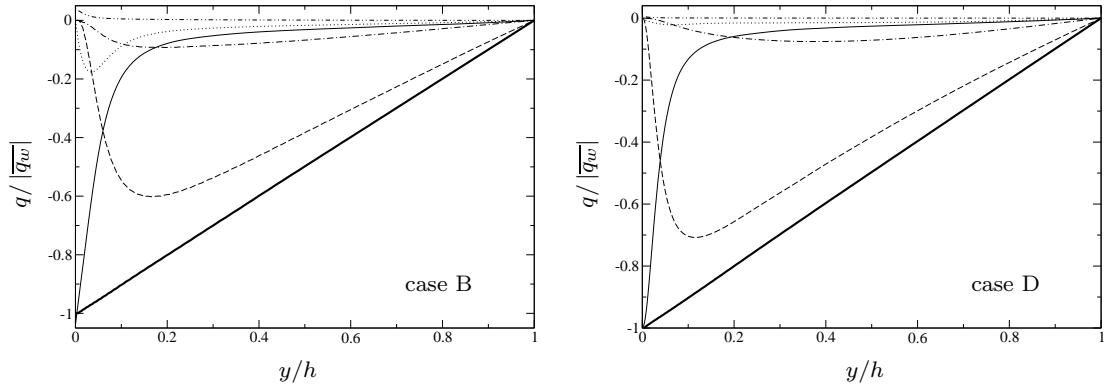


Figure 2.22 : Heat flux balance scaled by the modulus of the flux at the wall $|\overline{q_w}|$.
 - - - - : turbulent flux of sensible enthalpy, $\overline{\rho v'' \widetilde{h_s''}}$;
 - · - · : turbulent flux of chemical enthalpy, $\overline{\rho \sum_k v'' Y_k'' \Delta h_{f,k}^0}$;
 ——— : Fourier heat flux, $-\overline{\lambda \frac{dT}{dy}}$;
 ····· : species diffusion flux, $\overline{\rho \sum_k \{h_k Y_k V_{k,y}\}}$;
 - - - - : viscous effect integrated in the wall normal direction, $-\int \overline{\tau_{iy} \frac{du_i}{dy}} dy$;
 ——— : full total heat flux, $\overline{q_{tot}} - \int \overline{\tau_{iy} \frac{du_i}{dy}} dy$.

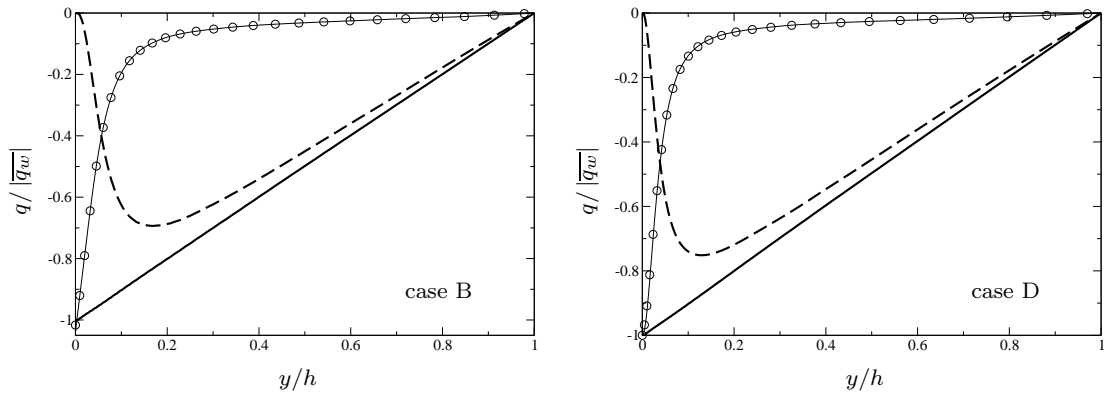


Figure 2.23 : Heat flux balance scaled by the modulus of the flux at the wall $|\overline{q_w}|$.
 ——— : Fourier flux, $-\overline{\lambda \frac{dT}{dy}}$;
 - - - - : turbulent flux of specific enthalpy, $\overline{\rho v'' \widetilde{h''}} = \overline{\rho v'' \widetilde{h_s''}} + \overline{\rho \sum_k v'' Y_k'' \Delta h_{f,k}^0}$;
 ——— : full total heat flux, $\overline{q_{tot}} - \int \overline{\tau_{iy} \frac{du_i}{dy}} dy$;
 ○ : approximation of the Fourier flux, $-\overline{\lambda \frac{dT}{dy}}$.

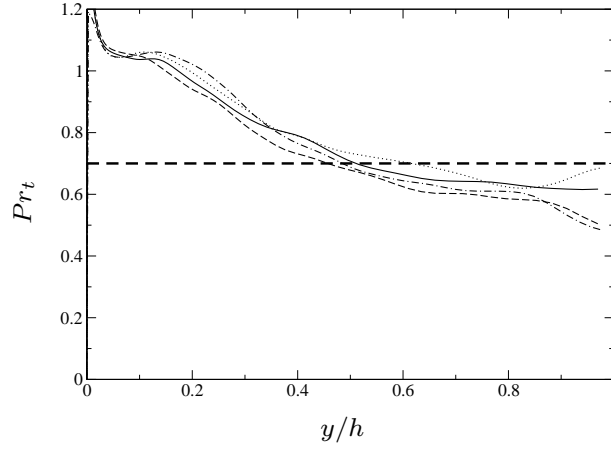


Figure 2.24 : Turbulent Prandtl number. — : case A; : case B; - - - : case C; - - - - : case D; - - - - : $Pr_t = 0.7$.

one can be modeled with the classical approximation:

$$\bar{\rho} \widetilde{v'' h_s''} \approx \bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v'' T''} \approx -\lambda_t \frac{d\bar{T}}{dy} \quad (2.36)$$

where λ_t is the turbulent heat diffusion coefficient. Assuming a Reynolds analogy, λ_t can be expressed as:

$$\lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \quad (2.37)$$

where Pr_t is the turbulent Prandtl number, usually taken to a constant value. Figure 2.24 shows the evolution of the turbulent Prandtl number computed in the simulations as:

$$Pr_t = \frac{\widetilde{u'' v''} \frac{d\bar{T}}{dy}}{\widetilde{v'' T''} \frac{d\bar{u}}{dy}} \quad (2.38)$$

and suggests that $Pr_t = 0.7$ for the current set of simulations which is an acceptable value [113]. This figure also reveals that chemical reactions and strong temperature gradient do not influence the turbulent Prandtl number behavior because the results are similar for case A, B, C and D. Finally, we propose the following expression to model the turbulent flux of sensible enthalpy:

$$\bar{\rho} \widetilde{v'' h_s''} \approx -\frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \frac{d\bar{T}}{dy} \quad (2.39)$$

This model is tested with the database of cases B and D, and the results are reported in Fig. 2.25 that shows a good agreement for the first approximation, $\bar{\rho} \widetilde{v'' h_s''} \approx \bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v'' T''}$. Moreover, the model with $Pr_t = 0.7$ and the value of μ_t taken from the simulations (i.e. $\mu_t = -\bar{\rho} \widetilde{u'' v''} / (d\bar{u}/dy)$)

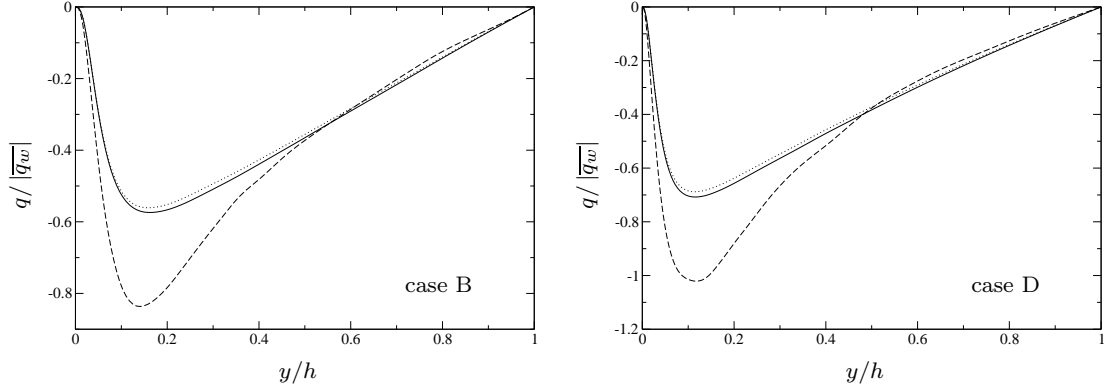


Figure 2.25 : A priori test for the turbulent flux of sensible enthalpy. — : simulation, turbulent flux of sensible enthalpy, $\bar{\rho} \widetilde{v'' h_s''}$; : simulation, first approximation, $\bar{\rho} C_p \widetilde{v'' T''}$; - - - : model, $-\frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{dT}{dy}$.

gives a very good prediction for the turbulent flux of sensible enthalpy attesting the quality of this model. Note that the value of μ_t could have also been modeled with the Prandtl mixing-length model described above but the goal here is to discuss the model with a constant value of Pr_t assuming that μ_t is perfectly approximated.

Concerning the turbulent flux of chemical enthalpy, one makes use of a gradient type model for species diffusion closed with a turbulent Schmidt number $Sc_{t,k}$ for each k -species. We recall that the chemical equilibrium assumption for the mixture composition has been verified in Sec. 2.3.1 which allows to propose the following model for the turbulent diffusion of each k -species:

$$\bar{\rho} \widetilde{v'' Y_k''} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{dy} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \left. \frac{d\bar{X}_k}{dT} \right|_{eq} \frac{dT}{dy} \quad (2.40)$$

Summing over all the species finally gives the model for turbulent flux of chemical enthalpy:

$$\bar{\rho} \sum_k \widetilde{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0 \approx -\sum_k \frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \left. \frac{d\bar{X}_k}{dT} \right|_{eq} \frac{dT}{dy} \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.41)$$

In order to determine which values of the turbulent Schmidt numbers could be retained for the final model, they have been computed in the simulations as:

$$Sc_{t,k} = \frac{\widetilde{u'' v''} \frac{d\bar{X}_k}{dy}}{\widetilde{v'' X_k''} \frac{d\bar{u}}{dy}} \quad (2.42)$$

Averaging over all the species, the mean turbulent Schmidt number and its standard deviation are obtained and shown in Fig. 2.26. The same treatment is also done for the turbulent Lewis numbers, $Le_{t,k} = Sc_{t,k}/Pr_t$. A first result visible in this figure is that the standard deviation of the turbulent

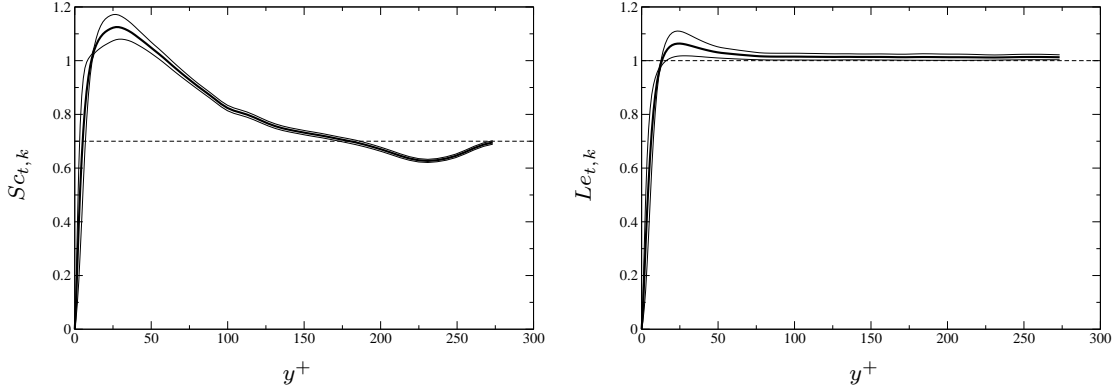


Figure 2.26 : Turbulent Schmidt and Lewis numbers of case B (results for case D are similar).

— : averaged value of all the species; — : averaged value \pm standard deviation;
 - - - : models proposed, $Sc_{t,k} = 0.7$ and $Le_{t,k} = 1$.

Schmidt and Lewis numbers for all the species remain weak. This is convenient because we can assume from this result that $Sc_{t,k}$ and $Le_{t,k}$ are not dependent on the species which means that a unique value can be imposed. Moreover, it is verified that the classical approximation consisting in taking the turbulent Lewis numbers equal to unity is a very good model. This illustrates that the turbulent diffusion of the species and of the temperature behave in a similar way. The wall model is then built with the assumption $Sc_{t,k} \approx Pr_t$. Hence, Eq. (2.41) is tested in Fig. 2.27 taking the profile of temperature from the simulations and $Sc_{t,k} = 0.7$. The turbulent dynamic viscosity μ_t is also taken from the simulations so that we can check the quality of this model without including the effects of the Prandtl mixing-length model. Finally, Eq. (2.41) appears to be an efficient model.

Now that we have determined the appropriated models for the turbulent contributions of the total heat flux, we can follow the derivation of the wall model by replacing Eq. (2.39) and Eq. (2.41) into Eq. (2.35). Moreover, in a modeling context, the laminar Fourier heat flux can be neglected because the first off-wall point is in the fully turbulent region, and $\overline{q_{tot}}$ can be replaced by $\overline{q_w}$ because the total heat flux is constant when $\overline{Q} = 0$. All these manipulations leads to the following model for the wall heat flux:

$$\overline{q_w} \approx -\mu_t \left(\frac{\overline{C_p}}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_{t,k}} \sum_k \frac{W_k}{\overline{W}} \left. \frac{d\overline{X}_k}{d\overline{T}} \right|_{eq} \Delta h_{f,k}^0 \right) \frac{d\overline{T}}{dy} \quad (2.43)$$

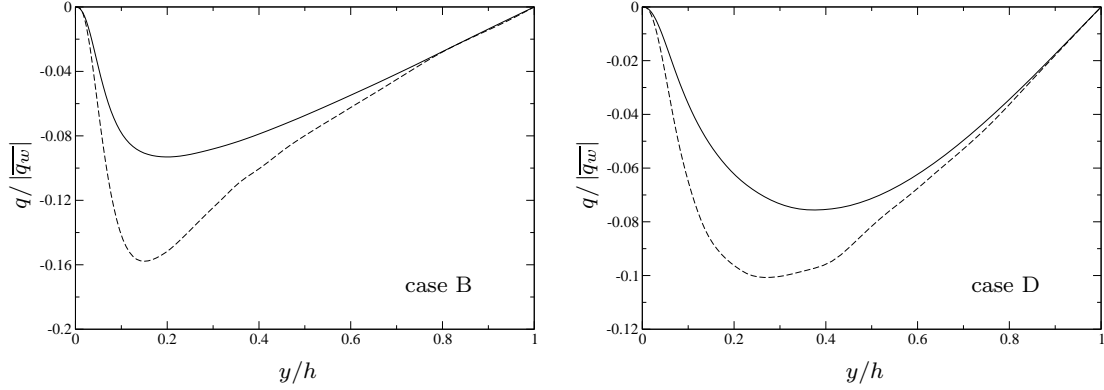


Figure 2.27 : A priori test for the model of turbulent flux of chemical enthalpy. — : simulation, turbulent flux of chemical enthalpy, $\bar{\rho} \sum_k \widetilde{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0$; - - - : model, $-\sum_k \frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{dT} \Big|_{eq} \frac{d\bar{T}}{dy} \Delta h_{f,k}^0$.

2.4.3 Derivation of the coupled model

The first part of the wall model derivation has led to an expression for $\overline{\tau_w}$, the mean shear stress at the wall Eq. (2.30), and for $\overline{q_w}$, the mean wall heat flux Eq. (2.43). These two equations constitute a system that we will manipulate in order to find the equations for the velocity and the temperature in wall units.

We start by computing the ratio $\overline{q_w}/\overline{\tau_w}$ which gives the following expression for the temperature gradient:

$$\frac{d\bar{T}}{dy} = - \frac{\overline{q_w}}{\overline{\tau_w} \left(\frac{\overline{C_p}}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_{t,k}} \sum_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{dT} \Big|_{eq} \Delta h_{f,k}^0 \right)} \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (2.44)$$

Integrating this relation in the wall normal direction and assuming that $\overline{C_p}$ and \bar{W} do not vary too much in the boundary layer ($\overline{C_p}(y) = C_p$ and $\bar{W}(y) = W$, justified by Fig. 2.28) leads to an equation of the type:

$$\frac{\bar{T}}{T_w} = D - \alpha u^+ \quad (2.45)$$

where D is an integration constant, and:

$$\alpha = \frac{C_p B_q}{\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_{t,k}} \sum_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{dT} \Big|_{eq} \Delta h_{f,k}^0} \quad (2.46)$$

and:

$$B_q = \frac{T_\tau}{T_w} = \frac{\overline{q_w}}{\rho_w C_p u_\tau T_w} \quad (2.47)$$

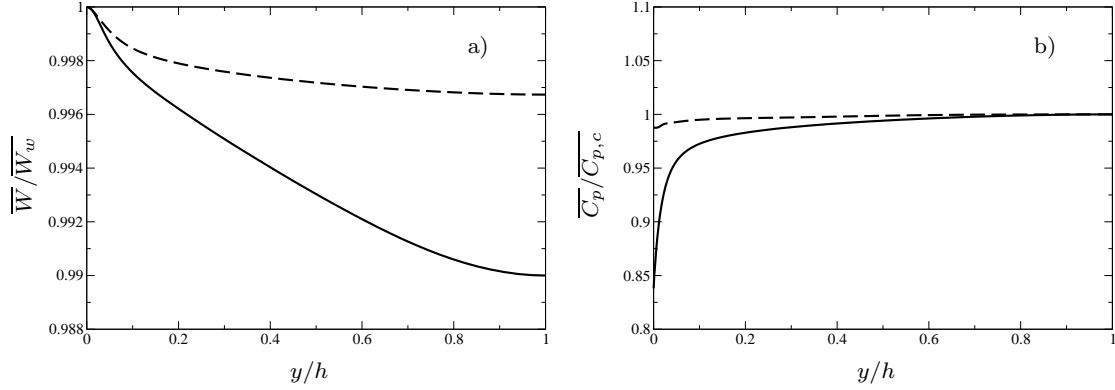


Figure 2.28 : a) Mean molecular weight profile scaled by its value at the wall. b) Mean heat capacity at constant pressure scaled by its value at the centerline. --- : case B; — : case D.

Making use of the wall unit scaling for the temperature gives the generic expression for T^+ :

$$T^+ = \frac{1 - D}{B_q} + \frac{\alpha}{B_q} u^+ \quad (2.48)$$

where the integration constant D still has to be determined.

Because the variation of the ratio $\overline{W}/\overline{W}_w$ is negligible in the boundary layer (Fig. 2.28 shows that even for the case of significant temperature gradient the variation is less than 1%), we can use the equation of state for perfect gas and write $\overline{p}/\rho_w \approx T_w/\overline{T}$. Thanks to this relation and Eq. (2.45), the Van Driest transformation Eq. (2.32) can be integrated as:

$$\int_0^{u^+} \left(\frac{T_w}{\overline{T}} \right)^{1/2} du^+ = \int_0^{u^+} \left(\frac{1}{D - \alpha u^+} \right)^{1/2} du^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.49)$$

which finally gives an equation for u^+ :

$$\frac{2}{\alpha} \left(\sqrt{D} - \sqrt{D - \alpha u^+} \right) = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.50)$$

We now have the two equations of the coupled wall model, Eq. (2.50) and Eq. (2.48), but we still have to determine the two constants C and D in order to complete the development of the wall model. Concerning the first one, we have seen in Fig. 2.20 that the classical value $C = 5.5$ for wall-bounded flow can be assumed (the value $C = 5.2$ being reserved for external boundary layers), associated with $\kappa = 0.41$. Note that the values advocated by Österlund *et al.* [173], $\kappa = 0.38$ and $C = 4.1$, could have been also retained.

The constant D is determined by imposing the wall model to recover the classical logarithmic formulations for velocity and temperature for non-reacting isothermal flows. Hence, D must satisfy two constraints:

- a) when $B_q \rightarrow 0$ (i.e. the flow tends to be isothermal), one must have $D \rightarrow 1$ to recover the classical logarithmic law for velocity;
- b) when $B_q \rightarrow 0$, Eq. (2.48) must be bounded. For instance, this can be verified if $(1-D)/B_q$ is a constant that does not depend on B_q .

Because in a turbulent boundary layer the temperature profile is sensitive to the molecular Prandtl number [114], one decides to pose:

$$\frac{1-D}{B_q} = K(Pr) \quad (2.51)$$

where $K(Pr)$ is a constant that only depends on the molecular Prandtl number. In this way, the two constraints for D are satisfied. Hence, when $B_q \rightarrow 0$ (isothermal case) and $\alpha \rightarrow Pr_t B_q$ (no chemistry) the two equations, Eq. (2.50) and Eq. (2.48), tends to the classical logarithmic formulations ($u^+ = 1/\kappa \ln y^+ + C$ and $T^+ = Pr_t/\kappa \ln y^+ + constant(Pr)$). To go further in the determination of the $K(Pr)$ constant, one chooses to make use of the Kader's function [108] as the reference equation for temperature profile because it takes into account the effect of the molecular Prandtl number in its formulation (for $6 \times 10^{-3} < Pr < 40 \times 10^3$). When the laminar part of the Kader's function tends to zero, the turbulent part remains and we have:

$$T_K^+ = 2.12 \ln y^+ + \beta(Pr) \quad (2.52)$$

where $\beta(Pr)$ is a function of the molecular Prandtl number defined as:

$$\beta(Pr) = \left(3.85 Pr^{1/3} - 1.3\right)^2 + 2.12 \ln Pr \quad (2.53)$$

One arbitrarily decides to determine the $K(Pr)$ constant by minimizing the square difference between Eq.(2.52) and Eq.(2.48) (i.e. $(T^+ - T_K^+)^2$) in the limit $B_q \rightarrow 0$ and $\alpha \rightarrow Pr_t B_q$, for $100 < y^+ < 200$. This leads to an analytical expression for $K(Pr)$:

$$K(Pr) = \beta(Pr) - Pr_t C + \left(\frac{Pr_t}{\kappa} - 2.12\right) (1 - 2 \ln(20)) \quad (2.54)$$

Hence, the wall model is able to take into account the effects of the molecular Prandtl number, the strong temperature gradients, and the chemical reactions while being consistent with the classical logarithmic formulations for velocity and temperature.

Now that all the terms of the wall model are defined one can proceed to the evaluation of its efficiency performing *a priori* tests.

2.4.4 A priori tests

Knowing a set of outer conditions ($u_{out}, T_{out}, Y_{k,out}$) at the wall distance y_{out} , and the temperature at the wall T_w it is possible to invert the system of equations, Eq. (2.48) and Eq. (2.50),

κ	C	$K(Pr)$	Pr_t	$Sc_{t,k}$	$\overline{\rho_w}$	C_p	W
0.41	5.5	-0.5	0.7	0.7	$T_w W_w _{eq}/R p_{out}$	$C_{p,w} _{eq}$	W_{out}

Table 2.9 : Set of variables retained for the inversion of the law-of-the-wall Eq. (2.48) and Eq. (2.50).

to assess the wall fluxes. In order to test the efficiency of this coupled wall model several sets of outer conditions have been built from the mean profiles of the present simulations (the mean velocity, mean temperature and mean mass fraction profiles are used to generate u_{out} , T_{out} , and $Y_{k,out}$, respectively). The wall fluxes resulting from the inversion of the coupled wall model can then be confronted to their exact values taken from the simulations. The parameters used for the inversion are summed up in table 2.9 where R is the perfect gas constant, $W_w|_{eq} = \sum_k X_{k,w}|_{eq} W_k$ is the molecular weight of the mixture at the wall determined with the equilibrium assumption, $C_{p,w}|_{eq} = \sum_k C_{p,k} Y_{k,w}|_{eq}$ is the heat capacity at constant pressure evaluated at the wall from the wall temperature (which is a known value) and the equilibrium concentration profiles, and $W_{out} = \sum_k X_{k,out} W_k$ the molecular weight at the outer condition. Note that because the pressure is constant in the boundary layer, the outer pressure p_{out} is used to determine the wall density. Results are shown in Fig. 2.29. In these plots, the predicted wall shear stress, τ_w^{model} , and wall heat flux, q_w^{model} , are scaled by their exact DNS/LES counterparts. The values given by the standard wall function for mean velocity and by the Kader's correlation for temperature [108] are also plotted to illustrate the efficiency of the new model. Note that in Fig. 2.29 the determination of q_w from the Kader function, Eq. (2.52), is done by determining y^+ thanks to the classical law-of-the-wall for velocity.

For all the cases, the coupled wall model is more efficient than standard functions: the new model exhibits a large plateau for $y_{out} > 0.2h$ where the error is a few percents (between 5% and 20%, say). Of course profiles vanish for $y_{out} < 0.2h$ because the wall model is not expected to hold in the viscous sublayer. In case A, the effects of variable density and chemistry are not present which explains a good collapse of both the new and standard models. In the case of multi-component reacting flow with smooth temperature gradient (case B), the model clearly improves the prediction which shows that the chemical part of the model behaves well: with the new wall model, the error on the wall heat flux prediction is damped to 5% whereas the error is around 20% for the standard model.

Concerning the strong temperature gradient cases C and D, the standard functions commit an error of 100% and 60% on the wall shear stress and heat flux respectively. These predictions are clearly improved by the new wall model developed herein which works pretty well without chemistry and strong temperature variations (in case C, errors are lowered to 15% for the wall shear stress and 10% for the wall heat flux) and shows a moderate discrepancy when chemical reactions are considered (case D).

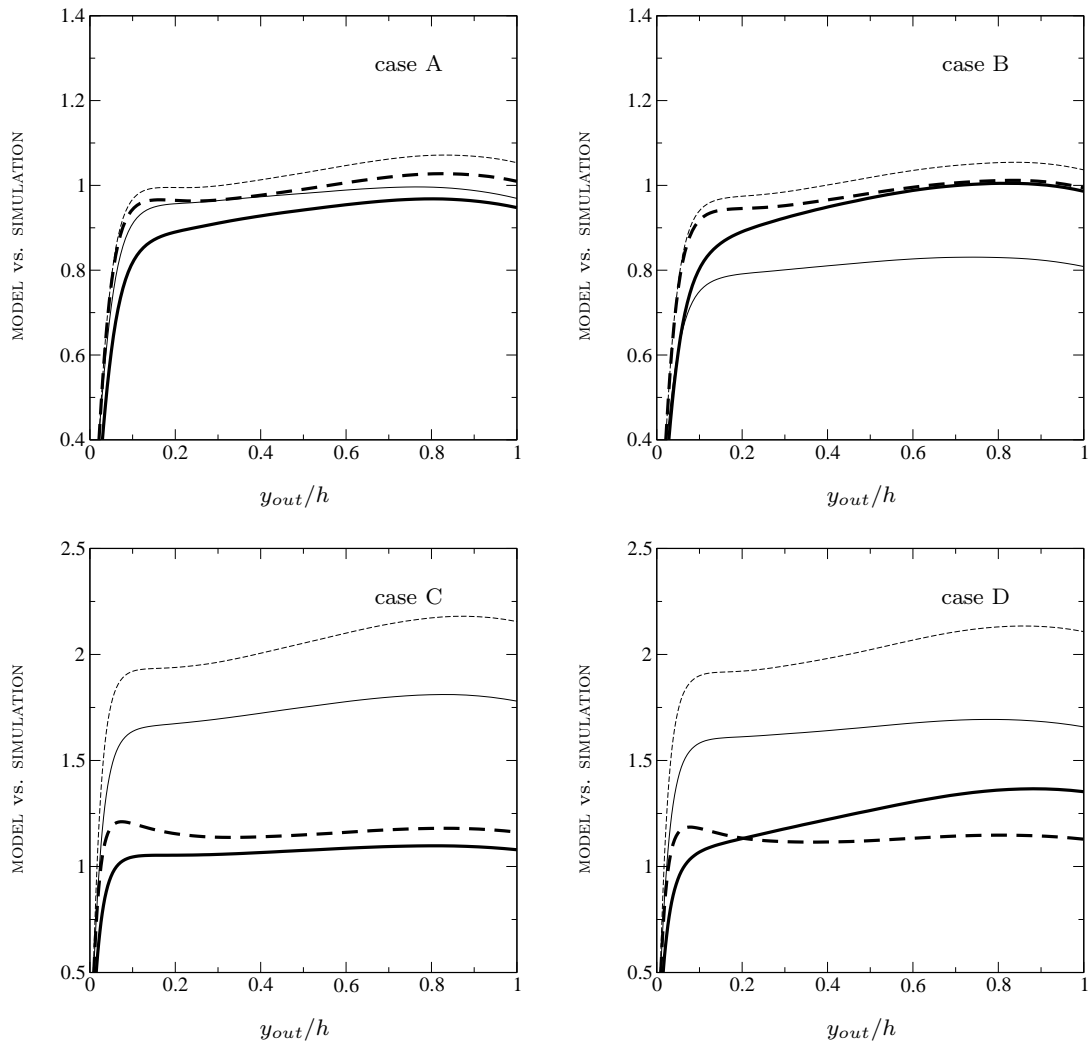


Figure 2.29 : Wall heat flux and viscous stress scaled by their exact counterparts from the DNS/LES.
 - - - : τ_w from the new wall model; — : q_w from the new wall model; ···· : τ_w from the standard law-of-the-wall, $u^+ = 1/\kappa \ln y^+ + C$; — — — : q_w from the Kader correlation [108], Eq. (2.52).

The current model has been developed under the assumption of a flow at infinite Reynolds number. The DNS/LES are at moderate Reynolds number which could explain the little discrepancies observed in these *a priori* tests. Moreover, one recall that no specific tuning of the free coefficients has been done because the aim of this study is to obtain a law-of-the-wall with appropriate dependancies and scaling between the wall unknowns and the outer variables. For instance, the error in the prediction of the wall heat flux can be lowered by 8% for case D, taking $Pr_t = 0.65$ (which would fit better the DNS data than $Pr_t = 0.7$), and the values advocated by Österlund *et al.* [173] for C and κ .

Hence, the velocity/temperature/chemistry coupled law-of-the-wall developed in this study appears to behave well with reacting flows at low Mach number, with or without temperature gradient which opens a wide range of numerical investigations (by RANS calculations) for industrial applications in such a flow configuration.

2.4.5 Adaptation of the wall model to the standard k - ϵ model for RANS calculations

When wall functions are used in a numerical solver, one needs to prescribe a model for each transported variable. Thus wall functions have to be provided not only for velocity and energy variables but also for any turbulence variables simulated. The most implemented turbulence model for RANS calculations is probably the k - ϵ one [134] that transports the turbulence energy, $k = \widetilde{u_i'' u_i''}/2$, and its dissipation rate, ϵ . This model is based on a linear constitutive law of the type:

$$\widetilde{u_i'' u_j''} = -2\nu_t S_{ij} + \frac{2}{3}k\delta_{ij} \quad (2.55)$$

where $S_{ij} = (\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i)/2$, and $\nu_t = C_\mu k^2/\epsilon$. The turbulence production, P , is then expresses as $P = 2\nu_t S_{ij} S_{ij}$.

Hence, for duct flows or external boundary layers, the expression of turbulence production is reduced to:

$$P = -\widetilde{u'' v''} \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (2.56)$$

which is modeled in the k - ϵ model by:

$$P = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)^2. \quad (2.57)$$

Moreover, identifying Eq. (2.56) and Eq. (2.57), and making use of the classical assumption that production and dissipation of turbulence energy are in balance in the near wall region, $P = \epsilon$, we find the classical result $C_\mu = \widetilde{u'' v''}^2/k^2$. Because the experiments show that in the inertial logarithmic region of a boundary layer, $-\widetilde{u'' v''}/k = 0.3$, the constant of the model is set to

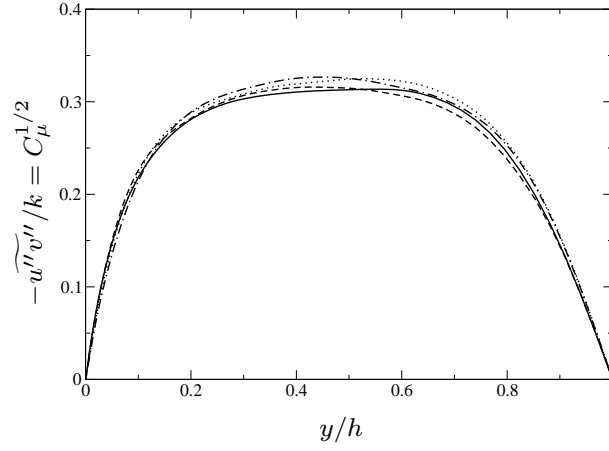


Figure 2.30 : Evaluation of $C_\mu^{1/2}$ in the present simulations. — · — : case A; ····· : case B; - - - - : case C; — : case D.

$C_\mu = 0.09$. As shown in Fig. 2.30, the present simulations also support the use of this value for the reacting compressible turbulent boundary layer. Finally, we find the standard relation between the turbulent shear stress and the turbulence energy:

$$C_\mu^{1/2}k = -\widetilde{u''v''}. \quad (2.58)$$

We have seen that the laminar shear stress vanishes in the turbulent region and for this reason we can assume that the shear stress is constant in the turbulent region and thus equals the wall shear stress, τ_w . Rearranging Eq. (2.27) we find that:

$$\overline{\rho_w}u_\tau^2 \approx -\overline{\rho} \widetilde{u''v''} \quad (2.59)$$

and combining this equation with Eq. (2.58) we find the final expression for k :

$$k = \frac{\overline{\rho_w}}{\overline{\rho}} \frac{u_\tau^2}{C_\mu^{1/2}}. \quad (2.60)$$

Regarding the dissipation rate, because equilibrium between production and dissipation is assumed, we find the the same expression as Eq. (2.56):

$$\epsilon = -\widetilde{u''v''} \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (2.61)$$

and the use of Eq. (2.59) allows to go further:

$$\epsilon = \frac{\overline{\rho}}{\overline{\rho_w}} u_\tau^2 \frac{d\bar{u}}{dy}. \quad (2.62)$$

where $d\bar{u}/dy$ can be expressed by rearranging Eq. (2.30):

$$\frac{d\bar{u}}{dy} = \left(\frac{\bar{\rho}_w}{\bar{\rho}} \right)^{1/2} \frac{u_\tau}{\kappa y} \quad (2.63)$$

which finally gives the expression for ϵ :

$$\epsilon = \left(\frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_w} \right)^{1/2} \frac{u_\tau^3}{\kappa y} \quad (2.64)$$

Hence, Eq. (2.60) and Eq. (2.64) give the expressions to prescribe for k and ϵ in the turbulent region. Compressibility (arising from a significant temperature gradient) and chemistry effects appear in the term u_τ , determined by the resolution of the coupled system formed by Eq. (2.48) and Eq. (2.50). The ratio $\bar{\rho}_w/\bar{\rho}$ also translates the strong temperature gradient effect on k and ϵ . Note that when the temperature variation tends to zero, this ratio tends to one and the classical expressions, $k = u_\tau^2/C_\mu^{1/2}$ and $\epsilon = u_\tau^3/(\kappa y)$, are recovered.

The integration of these two expressions into a numerical solver depends of course of the numerical method retained but we remind that Eq. (2.60) and Eq. (2.64) are only valid in the logarithmic region. For a cell-centered solver, it could be interesting to combine these equations with the method proposed by Craft *et al.* [56, 54] to account for a correct behavior of k and ϵ till the wall, and so in the laminar region.

2.5 Conclusions

The current paper presents a set of DNS and wall-resolved LES of periodic plane channel flow that constitutes a reference database for analyzing mean behavior of wall turbulence in the case of multicomponent reacting flows at low Mach number, with or without compressibility effect (the compressibility being due to a strong temperature gradient).

The study has revealed that the classical assumptions for boundary layer flows are still valid for multicomponent reacting flows, among them: the efficiency of the Boussinesq assumption combined with the Prandtl mixing-length for modeling the turbulent shear stress; the validity of the Van Driest transformation up to a temperature ratio of 3; and the efficiency of the Reynolds analogy for modeling the turbulent flux of sensible enthalpy. Moreover, it has been demonstrated that the power of pressure forces and the viscous effect terms could be neglected in the process of energy conservation.

This work has also presented some new findings concerning the multicomponent part of the Navier-Stokes equations for turbulent boundary layer flows. First, it appears that the composition of the mixture is at the equilibrium state which strongly simplifies the modeling. Second, the

molecular species diffusion is negligible in the turbulent region. Third, a model for the turbulent flux of chemical enthalpy has been proposed and successfully validated. In addition, the turbulent Prandtl number appears to be insensitive to the chemical reactions and the strong temperature gradient. The present data also confirm that taking the turbulent Lewis number to unity is a good approximation which implies to take $Sc_{k,t} = Pr_t$. Note finally that it has also been shown that the Dufour part of the molecular heat flux could be neglected for such cases of study.

Simplifying the Navier-Stokes equations and replacing the turbulent terms by their model counterpart, a new law-of-the-wall useable in RANS computations is proposed to estimate the wall shear stress as well as the wall heat flux from the knowledge of a set of outer/wall conditions. This formulation stands for the general case of multicomponent reacting compressible turbulent flows and degrades in the classical formulations when the temperature gradient tends to zero and the chemistry effects are null. This law-of-the-wall also recognizes that the energy and momentum equations are coupled for large temperature variations (i.e. large density variations) and gives reasonable results when confronted to the DNS/LES database with *a priori* tests. Moreover, although the current work only deals with one type of mixture (the species and the Prandtl number of the mixture are unchanged), the law-of-the-wall has been developed without any assumption concerning the species involved and the molecular Prandtl number. Thus this wall model should behave well with any other mixture.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors are grateful to CNRS/DGA for funding this work and want to acknowledge the financial support and expertise of Snecma Propulsion Solide (SAFRAN group). We want to thank the CINES (Centre Informatique National pour l'Enseignement Supérieur) for the access to supercomputer facilities. J.M. Déoclézian is also gratefully acknowledged for fruitful discussions.

Limites et extensions du modèle développé pour parois inertes

Dans ce chapitre, on présente des possibilités d'extension de la loi développée dans le chapitre précédent. On aborde uniquement la question des transferts radiatifs et du gradient de pression longitudinal. Ce chapitre présente des résultats partiels qui devront faire l'objet d'études plus approfondies.

3.1 Transferts radiatifs

Etant donnés les niveaux de température qui interviennent dans les moteurs à propergol solide, ainsi que l'aspect multi-espèces des produits de combustion, la question de l'influence des transferts radiatifs intervient naturellement. Au sein des couches limites, le terme radiatif peut alors perturber l'équilibre entre les différentes contributions du flux de chaleur total, le milieu gazeux se comportant comme un absorbant/producteur d'énergie. Le flux de chaleur pariétal se trouve alors modifié, ce dont le modèle de paroi doit tenir compte. Si ce terme radiatif est important, un couplage entre la conservation de l'énergie et le comportement dynamique de l'écoulement est aussi envisageable, ce qui modifierait également le frottement pariétal.

Pour étudier l'influence du transfert radiatif, une étude a été réalisée en couplant le code de calcul fluide avec un code de calcul dédié à l'évaluation des termes sources radiatifs. La configuration de canal périodique multi-espèces a été retenue pour réaliser ce couplage, et étudier l'influence du

rayonnement sur la structure de la couche limite et la prédiction des flux pariétaux. Ce travail a été mené par J. Amaya et a fait l'objet d'une publication dans *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* [7]. Il est présenté dans l'annexe A. Pour le mélange gazeux et les niveaux de température considérés, cette étude montre que le couplage entre l'écoulement et le terme radiatif reste négligeable. La couche limite se comporte comme un milieu optiquement mince ce qui signifie que la loi de paroi développée dans le chapitre précédent reste toujours valide. Cependant, l'introduction du terme source radiatif dans les équations de Navier-Stokes engendre l'apparition d'un flux radiatif pariétal. Ce flux radiatif peut simplement être ajouté au flux de chaleur prédit par la loi de paroi pour obtenir une prédiction fiable du flux de chaleur total. Ainsi, le modèle de paroi permettant de prendre en compte le transfert radiatif peut se résumer sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \tau_w = \tau_w^{\text{sans rayonnement}} \\ q_w = q_w^{\text{sans rayonnement}} + q_w^{\text{rayonnement}} \end{cases} \quad (3.1)$$

où $\tau_w^{\text{sans rayonnement}}$ et $q_w^{\text{sans rayonnement}}$ sont les résultats du modèle de paroi développé dans le chapitre précédent (ou issus de n'importe quel autre modèle équivalent disponible), et $q_w^{\text{rayonnement}}$ correspond au flux de chaleur radiatif pur. Tout le problème réside donc dans la détermination du terme $q_w^{\text{rayonnement}}$ qui peut se faire principalement suivants deux méthodes : 1) l'introduction dans le code de calcul fluide d'un modèle radiatif simple, basé sur l'hypothèse d'un milieu optiquement mince ; 2) le couplage entre deux codes de calcul fluide et radiatif. La première méthode permet d'obtenir un résultat rapide à moindre coût, alors que la seconde permet l'utilisation de modèles radiatifs plus complexes pour une meilleure prédiction. La deuxième option nécessite l'utilisation d'une méthode de couplage entre les codes de calcul numérique car le formalisme des équations de transport radiatif ne permet pas d'utiliser les mêmes méthodes numériques que pour la résolution des équations de Navier-Stokes. Cette approche est donc bien plus onéreuse, et ne semble pas appropriée aux attentes industrielles.

Le développement d'un modèle radiatif simple basé sur l'hypothèse d'un milieu optiquement mince semble être la bonne option. Elle n'est cependant pas indispensable car pour un point de fonctionnement typique de l'écoulement dans le convergent d'une tuyère, l'étude menée par Amaya [7] montre que le flux radiatif ne constitue que 7% du flux de chaleur total. Il peut donc être négligé en première approximation.

3.2 Gradient de pression longitudinal

Dans cette section, on étudie l'influence du gradient de pression longitudinal (la pression est supposée constante dans la direction normale à la paroi). Lorsque ce terme n'est pas négligeable, les équations qui ont servi au développement de la loi de paroi précédemment formulée ne sont plus valides. Il faut donc l'inclure dans les équations qu'on désire intégrer analytiquement.

D'un point de vue global, le gradient de pression longitudinal agit comme une force volumique qui pilote l'accélération, ou la décélération, de l'écoulement. Les études qui s'intéressent à cette problématique traitent surtout le cas des gradients de pression adverses [48, 224, 163, 214, 94, 101] qui décèlent l'écoulement et sont à l'origine du décollement des couches limites. Cette configuration intéresse particulièrement les aérodynamiciens pour l'étude des ailes d'avions par exemple.

A l'intérieur d'une tuyère, la problématique n'est pas la même car l'écoulement est soumis à un gradient de pression favorable qui accélère l'écoulement et contribue à sa stabilisation. Dans les quelques études qui abordent le sujet [12, 115, 220, 164], on introduit deux paramètres qui renseignent sur l'influence du gradient de pression :

- le gradient de pression adimensionnalisé, p_x^+ : défini par la relation

$$p_x^+ = \frac{\nu_w}{\rho_w u_\tau^3} \frac{dp}{dx} \quad (3.2)$$

ce nombre sans dimension évalue l'importance du gradient de pression. Ce dernier sera favorable lorsque $p_x^+ < 0$, et défavorable pour $p_x^+ > 0$. Selon Nickels [164], l'influence du terme de pression est négligeable pour les cas où $|p_x^+| < 0.005$. Au-delà de cette valeur il faudra le prendre en compte dans la prédiction des flux pariétaux.

- le paramètre d'accélération, K : c'est un nombre sans dimension défini à partir de grandeurs prélevées à l'extérieur de la couche limite

$$K = \frac{\nu_\infty}{u_\infty^2} \frac{\partial u_\infty}{\partial x} \quad (3.3)$$

Il mesure l'accélération de l'écoulement. Grâce à l'étude de ce paramètre, Back *et al.* [12] mettent en évidence la relaminarisation d'un écoulement turbulent dans une tuyère. Leurs données expérimentales indiquent que le phénomène de relaminarisation intervient pour $K > 2.6 \times 10^6$.

A partir de ces deux constats, on propose d'évaluer ces deux paramètres sur des tuyères de moteurs à propergol solide. Pour ce faire, on examine un jeu de données fourni par Snecma Propulsion Solide pour six tuyères. Ces dernières sont classées de l'indice #1 à #6, par ordre croissant de compacité géométrique : la tuyère #1 (qui correspond à un booster de la fusée Ariane 5) sera plus grande que la tuyère #6. Tous les résultats sont normalisés pour des raisons de confidentialité.

La figure 3.1 présente l'évolution du paramètre p_x^+ dans ces six tuyères. On inclut également sur ces graphiques l'évolution longitudinale de la pression normalisée par la pression à l'intérieur de la chambre de combustion. La confrontation de ces deux paramètres montre que le maximum du paramètre p_x^+ n'est pas observé au col (là où le gradient de pression est maximum). Ceci est notamment dû au frottement pariétal qui n'est pas constant le long de la tuyère. Contrairement à ce qu'on pourrait penser en premier lieu, l'influence du gradient de pression n'est donc pas maximum au niveau du col de la tuyère, mais intervient plutôt dans le convergent.

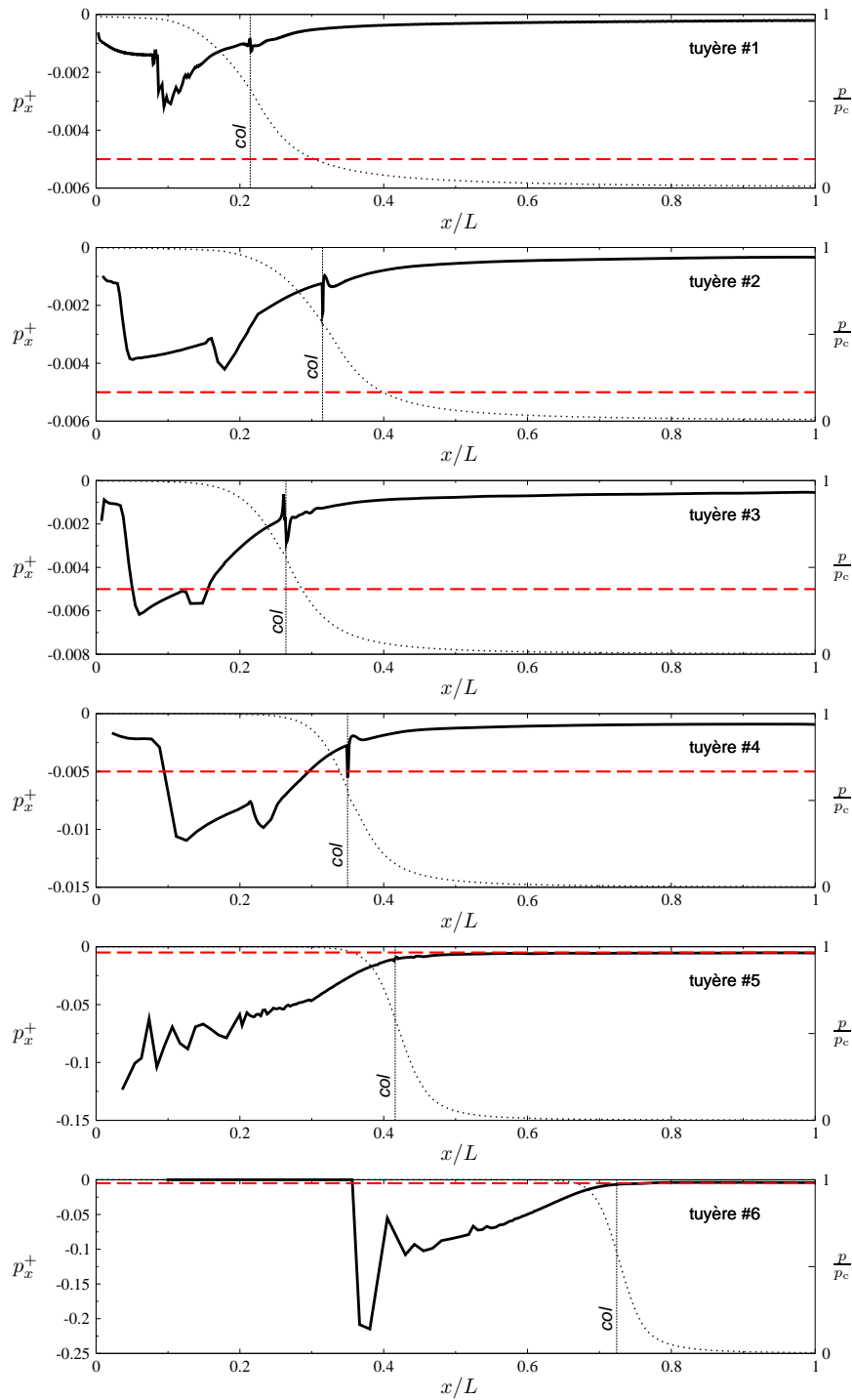


Figure 3.1 : Evolution du paramètre p_x^+ le long de différentes tuyères. L'abscisse curviligne x est normalisée par la longueur totale de la tuyère, L . — : p_x^+ ; - - - : critère de sensibilité, $p_x^+ = -0.005$; : pression normalisée par la pression à l'intérieur de la chambre p_c .

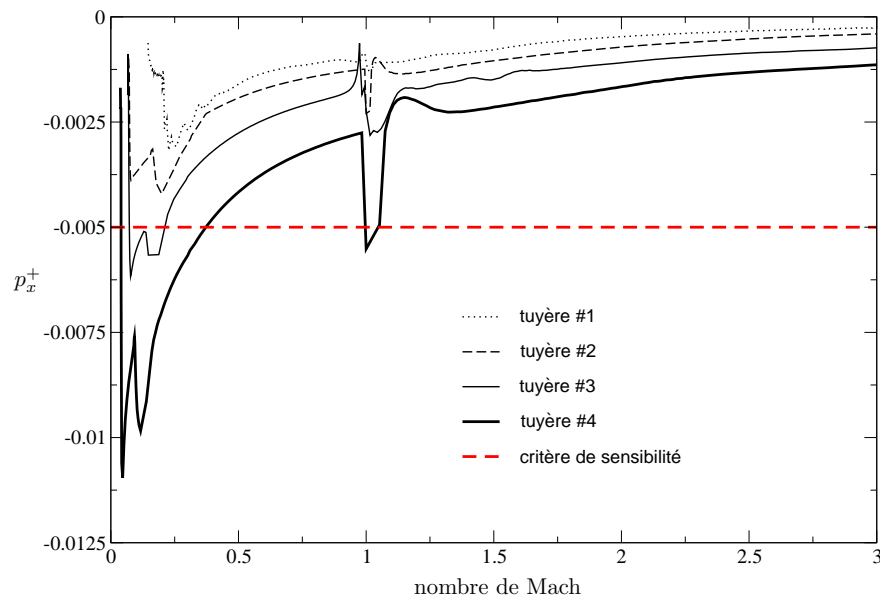


Figure 3.2 : Evolution du gradient de pression adimensionnalisé en fonction du nombre de Mach pour les quatre premières tuyères.

La figure 3.1 révèle également que plus la tuyère est géométriquement compacte, plus l'influence du gradient de pression est importante. Ainsi, selon le critère de Nickels [164], on pourra considérer que le gradient de pression est négligeable dans la prédiction des flux pariétaux pour les trois premières tuyères. La tuyère #4 franchit clairement le seuil de sensibilité, mais la valeur prise par p_x^+ reste raisonnable comparativement aux écoulements déjà étudiés dans la littérature. En revanche, les tuyères #5 et #6 présentent des valeurs de p_x^+ qui dépassent la valeur seuil de référence de plusieurs ordres de grandeur.

Mettons ces deux dernières tuyères de coté pour l'instant, et regardons l'évolution du paramètre p_x^+ en fonction du nombre de Mach sur les autres tuyères. Ce diagnostic est présenté sur la figure 3.2 et révèle que l'influence du gradient de pression n'est significatif que pour les régions de l'écoulement où le nombre de Mach est inférieur à 0.3. Cette remarque conduit à une conclusion importante en termes de modélisation : pour les tuyères de compacité géométrique restreinte (typique des quatre premières tuyères étudiées ici), les effets du nombre de Mach et du gradient de pression sont dissociables. Ceci devrait simplifier le développement de modèles de paroi capables de prendre en compte des gradients de pression modérés. A ce sujet on pourra consulter l'approche à deux échelles de vitesse proposée par Skote & Henningson [214], ou encore l'expression analytique du profil de vitesse (en unités pariétales) présentée par Nickels [164].

Etant donnée la valeur du paramètre p_x^+ sur ces quatre tuyères, on pourra cependant négliger l'influence du gradient de pression en première approximation. Ce commentaire est justifié par

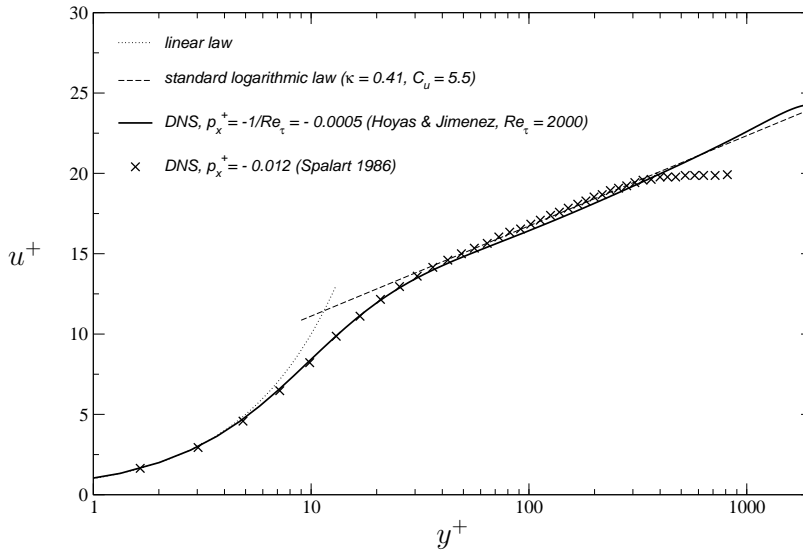


Figure 3.3 : Profils de vitesse en unités pariétales. Comparaison entre la DNS de canal périodique de Hoyas & Jiménez [95] (gradient de pression négligeable) avec une DNS de couche limite de Spalart [220] ($p_x^+ = -0.012$).

la figure 3.3 dans laquelle on compare le profil de vitesse (en unités pariétales) de la DNS de Hoyas et Jiménez [95] effectuée à $p_x^+ = -0.0005$ (on rappelle que pour une configuration de canal périodique $p_x^+ = -1/Re_\tau$) avec la DNS de Spalart [220] pour laquelle $p_x^+ = -0.012$ (valeur proche du maximum observé sur la tuyère #4). Cette comparaison indique clairement que la modification du profil de vitesse est minimale, et que l'hypothèse consistant à négliger le gradient de pression est encore valable pour $p_x^+ \sim -0.01$.

Afin de mieux comprendre ce qui se passe dans les tuyères #5 et #6, on trace le paramètre d'accélération sur la figure 3.4. On remarque que dans le convergent de la tuyère, ce paramètre est deux ordres de grandeur trop élevé par rapport à la valeur seuil de relaminarisation observée par Back *et al.* [12]. On peut donc s'attendre à un comportement laminaire de la couche limite dans cette partie de la tuyère (jusqu'au col), conduisant à l'emploi des relations laminaires classiques ($u^+ = y^+$ et $T^+ = Pr y^+$) pour la modélisation des flux pariétaux. Pour les tuyères plus grandes (#1 à #4) le phénomène de relaminarisation ne semble pas intervenir.

Concernant la problématique du gradient de pression, il paraît donc indispensable de différencier les applications en deux catégories : les tuyères classiques pour lesquelles le gradient de pression peut être négligé, et les tuyères géométriquement compactes pour lesquelles on doit utiliser les lois laminaires dans les régions où le paramètre d'accélération franchit le seuil de relaminarisation. Pour confirmer/contredire ces résultats à partir de données plus fines, on pourrait éventuellement mettre en place une simulation directe de couche limite spatiale.

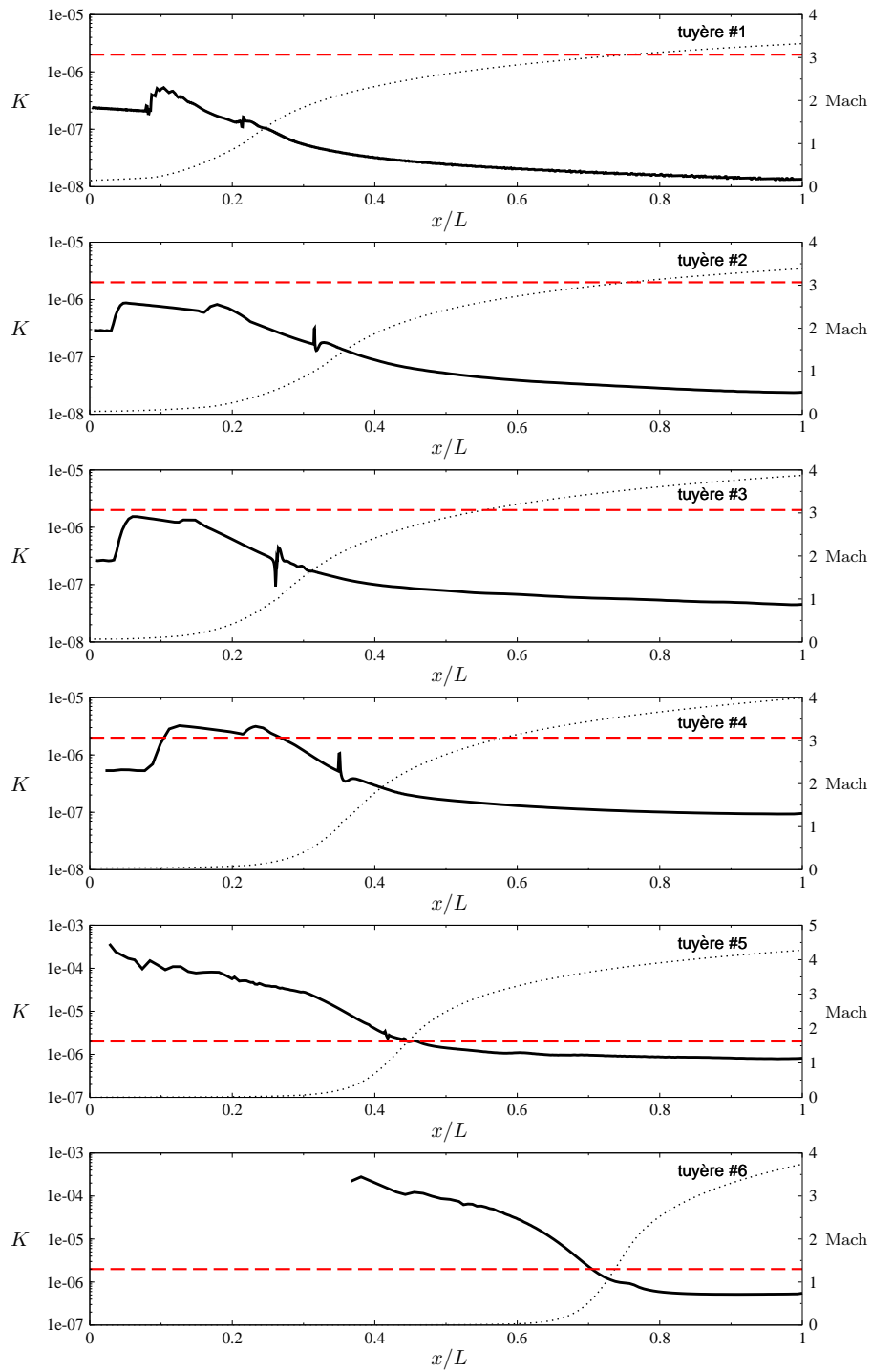


Figure 3.4 : Evaluation de la relaminarisation de l'écoulement pour quelques tuyères. L'abscisse curviligne x est normalisée par la longueur de la tuyère, L . — : paramètre d'accélération, K ; - - - : seuil de relaminarisation, $K = 2.6 \times 10^6$; : nombre de Mach.

Implémentation d'un modèle de paroi dans un code de calcul – *Tests a posteriori*

Dans ce chapitre on présente l'implémentation d'une loi de paroi couplée vitesse-température dans un code de calcul. Un code LES est retenu pour faire ce travail, mais les informations données ici restent compatibles avec l'utilisation d'une approche RANS. On précise toutefois que pour les codes RANS, il faudra également prescrire une loi de paroi pour les variables turbulentes transportées, ce qui dépend du modèle de fermeture retenu (par exemple pour le modèle $k - \epsilon$, il faudra aussi donner des lois de paroi pour la production et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente). Cette question n'est pas abordée ici, mais on pourra se servir des commentaires apportés dans la section 2.4.5, et consulter les travaux de Craft *et al.* [56, 54] qui proposent une stratégie intéressante pour traiter ces variables dans la première maille de calcul.

4.1 Implémentation du modèle dans un code de calcul

4.1.1 *Commentaire général sur les modèles de paroi*

L'implémentation d'une loi de paroi dans un code de calcul s'apparente souvent à la réalisation d'une recette de cuisine. Un même modèle ne délivrera pas les mêmes résultats suivant le code de calcul utilisé ou les choix d'écriture faits par le programmeur. De plus, il ne faut pas oublier que

c'est la pratique d'utilisation du modèle qui assure la qualité des résultats. La figure 4.1 résume les conditions qui garantissent l'obtention d'un résultat conforme au modèle théorique.

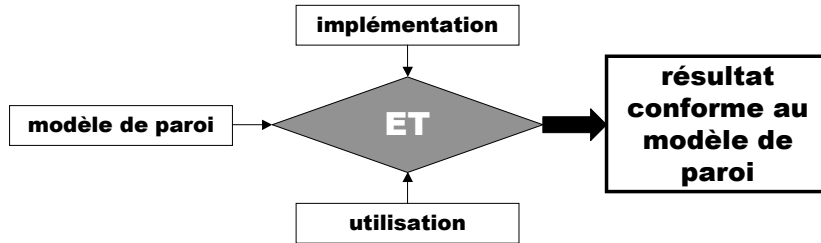


Figure 4.1 : Conditions d'obtention d'un résultat conforme au modèle de paroi utilisé.

Ces conditions ne sont cependant pas suffisantes pour certifier la conformité du résultat à la physique du problème qu'on cherche à résoudre : il faut également s'assurer que les hypothèses sur lesquelles repose le modèle de paroi correspondent bien à la physique de l'écoulement simulé. Les conditions d'obtention d'un résultat fiable par rapport à la physique de l'écoulement sont synthétisées sur la figure 4.2.

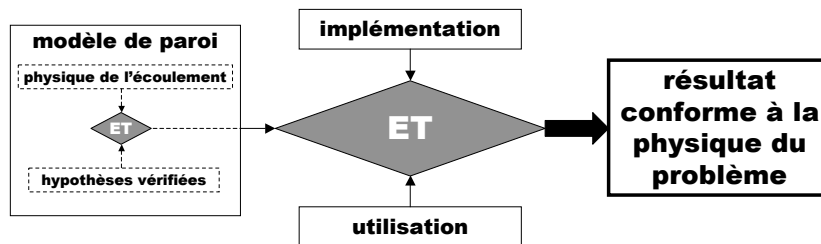


Figure 4.2 : Conditions d'obtention d'un résultat conforme à la physique du problème simulé.

Trois groupes fonctionnels apparaissent clairement : le modèle de paroi, l'implémentation, et l'utilisation. Nous avons déjà abordé la question du modèle de paroi et des particularités physiques qui peuvent influencer les couches limites dans les chapitres précédents. Concernant l'implémentation et l'utilisation du modèle, voici une liste de quelques paramètres qui ont leur influence.

implémentation du modèle

- *méthode numérique du code de calcul* : *cell-centered*, *vertex-centered*, ou *cell-vertex* (voir l'annexe B) ;
- *modèles de turbulence utilisés* : modèles RANS ($k - \epsilon$, $k - \omega$, ...) ou modèles LES (Smagorinsky, WALE, ...);
- *algorithme de résolution du modèle de paroi* : méthode de Newton-Raphson, méthode de Van Wijngaarden-Dekker-Brent, ou autre méthode ;

- *choix du type de raccordement entre la sous-couche visqueuse et la zone turbulente de la couche limite* : approche à “deux couches” avec détermination d’une distance à la paroi de coupure, utilisation d’une fonction de lissage, ou combinaison entre ces deux approches.

utilisation du modèle

- *position du premier point de calcul* : il doit se trouver dans un secteur de la couche limite pour lequel le modèle de paroi est utilisable, et en aucun cas à l’extérieur de la couche limite. Suivant le modèle utilisé, ce point pourra se situer soit dans la sous-couche visqueuse, soit dans la zone inertielle (région turbulente dans laquelle les fonctions logarithmiques sont valables), soit dans la zone externe de la couche limite (uniquement dans le cas où le modèle de paroi utilise une fonction de sillage, fonction non présentée dans ce document et rarement utilisée dans les codes de calcul¹). La fiabilité des résultats dans la zone tampon dépendra des options de raccordement retenues.

Concernant la distance maximale à laquelle on peut positionner le premier point de calcul, il est important de préciser deux choses qui portent souvent à confusion. Tout d’abord, si la loi repose sur un modèle de longueur de mélange, il faut que le premier point se situe dans la région $y/h < 0.1$ (au maximum $y/h < 0.2$), où h représente l’épaisseur de la couche limite. En effet, comme le montre la figure 2.18, au-delà de cette valeur, le modèle de longueur de mélange n’est plus valide. Dans le cas d’une simulation d’écoulement en conduite dont la discrétisation spatiale est régulière, cette remarque conduit à l’emploi d’au moins une vingtaine de points de calcul dans la direction normale à la paroi. La seconde remarque concerne la position extrême du premier point en termes de y^+ . Si l’écoulement est à haut nombre de Reynolds, on a tout intérêt à positionner ce point le plus loin possible tout en restant dans la couche limite. En effet, par habitude, les utilisateurs mettent souvent leur premier point autour de $y^+ \approx 100$, mais si l’épaisseur de la couche limite est de $h^+ \sim 1000$, on aura tout intérêt à placer le premier point autour de $y^+ \sim 800$ pour minimiser le coût de la simulation ;

- *maillage* : le type de maillage utilisé peut avoir une influence importante sur la qualité des résultats. On préférera par exemple des maillages constitués d’hexaèdres plutôt que de tétraèdres. Si le code de calcul le permet, on recommande d’utiliser des maillages hybrides : prismes à la paroi combinés à des tétraèdres pour le reste de la géométrie. Ceci permet d’assurer un bon fonctionnement du modèle de paroi tout en conservant le confort d’utilisation d’un maillage tétraédrique non-structuré pour mailler une géométrie complexe ;
- *problème simulé* : la validité des hypothèses du modèle de paroi peuvent s’effondrer dès que la configuration simulée diverge de la configuration de référence pour laquelle le modèle a été conçu.

¹Les fonctions de sillage sont rarement utilisées dans les configurations industrielles car une telle approche nécessite la connaissance préalable de l’épaisseur de la couche limite. Cette donnée n’est souvent pas accessible avant de lancer le calcul.

4.1.2 Formulation de la loi couplée vitesse-température

A partir de la loi de paroi formulée au chapitre 2, on dérive une loi de paroi simplifiée qui ne prend pas en compte les effets de la chimie. Dans cette situation, la variable α prend la valeur $\alpha = Pr_t B_q$, et la loi de paroi pour la région turbulente s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{2}{Pr_t B_q} \left(\sqrt{1 - K B_q} - \sqrt{\frac{T}{T_w}} \right) = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C_{vd} \\ T^+ = Pr_t u^+ + K \end{cases} \quad (4.1)$$

où C_{vd} est la constante de la transformée de Van Driest (on choisit $C_{vd} = 5.5$ ce qui correspond à la valeur retenue pour les écoulements internes de conduite), $\kappa = 0.41$ la constante de von Kármán, B_q le paramètre d'isothermicité $B_q = T_\tau/T_w$, Pr_t le nombre de Prandtl turbulent fixé à $Pr_t = 0.85$ (cette valeur est retenue pour être en accord avec la loi de Kader [108]), et K la constante qui dépend du nombre de Prandtl moléculaire et qui s'écrit :

$$K = \beta(Pr) - Pr_t C_{vd} + \left(\frac{Pr_t}{\kappa} - 2.12 \right) (1 - 2 \ln(20)) \quad (4.2)$$

en accord avec l'équation (2.54), où $\beta(Pr)$ est la constante proposée par Kader [108]

$$\beta(Pr) = \left(3.85 Pr^{1/3} - 1.3 \right)^2 + 2.12 \ln Pr \quad (4.3)$$

Au cas où le premier point de calcul se trouve dans la sous-couche visqueuse, il faut également considérer les lois laminares. On propose donc d'utiliser une approche classique à deux couches pour le profil de vitesse, et la fonction de lissage de Kader pour unifier le profil de température :

$$\begin{cases} \begin{cases} u^+ = y^+ & \text{si } y^+ < y_c^+ \\ \frac{2}{Pr_t B_q} \left(\sqrt{1 - K B_q} - \sqrt{\frac{T}{T_w}} \right) = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C_{vd} & \text{si } y^+ > y_c^+ \end{cases} \\ T^+ = (Pr y^+) e^\Gamma + (Pr_t u^+ + K) e^{1/\Gamma} \quad \text{avec } \Gamma = -\frac{10^{-2} (Pr y^+)^4}{1 + 5 Pr^3 y^+} \end{cases} \quad (4.4)$$

où y_c^+ correspond à la position de l'intersection entre la loi de vitesse pour la sous-couche visqueuse et la loi pour la région turbulente.

4.1.3 Algorithme de résolution

Pour résoudre numériquement la loi de paroi couplée (4.4), il est tout d'abord important de constater que la solution n'est mathématiquement pas définie pour $T_1 = T_w$ (T_1 désignant la

température au premier point de calcul). Bien que la notion de profil de température (et donc de flux de chaleur) ne soit pas compatible avec un écoulement isotherme, il est tout de même important d'assurer la définition du système pour $T_1 = T_w$.

Pour garantir la robustesse de l'algorithme de résolution, on propose donc de bifurquer vers les lois de paroi standards lorsque $T_1 = T_w$. Pour tous les autres cas, on utilise le système (4.4). Cette bascule entre les deux modèles n'introduit pas de discontinuités puisque la loi couplée se dégrade vers les lois standards quand le gradient de température tend vers zéro (voir le chapitre 2). En pratique, la branche de bifurcation n'est presque jamais empruntée car l'égalité $T_1 = T_w$ est rarement vérifiée à cause de la turbulence de l'écoulement et des erreurs numériques d'arrondi.

L'inversion du système (4.4) s'effectue en cherchant les variables u_τ et T_τ . Pour faire apparaître ces variables, on réécrit le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} u_\tau = \sqrt{\frac{u_1 \mu_w}{y_1 \rho_w}} \\ \frac{2 T_w (Pr_t u_1 + K u_\tau)}{Pr_t (T_w - T_1)} \left(\sqrt{1 - \frac{K}{T_w} \frac{T_w - T_1}{Pr_t u_1 + K u_\tau}} u_\tau - \sqrt{\frac{T_1}{T_w}} \right) \right. \\ \qquad \qquad \qquad = \left[\frac{1}{\kappa} \ln \left(y_1 \frac{\rho_w}{\mu_w} u_\tau \right) + C_{vd} \right] u_\tau \end{array} \right. \quad \text{si } y_1^+ < y_c^+ \\ \frac{T_w - T_1}{T_\tau} = \left(Pr \frac{\rho_w y_1 u_\tau}{\mu_w} \right) e^\Gamma + \left(Pr_t \frac{u_1}{u_\tau} + K \right) e^{1/\Gamma} \quad \forall y_1^+ \end{array} \right. \quad (4.5)$$

où les variables portant l'indice 1 correspondent aux quantités prélevées au premier point de calcul. On constate que sous cette forme, la variable T_τ n'apparaît pas sur les lois de la vitesse, on commencera donc par chercher u_τ avant de déduire T_τ . Voici l'algorithme de résolution qui a été choisi :

1. on résout la seconde équation du système (4.5) avec la méthode de Van Wijngaarden-Dekker-Brent [187] (appelée méthode de Brent par la suite)
2. si la valeur de u_τ trouvée correspond à $y_1^+ < y_c^+$ on ne conserve pas cette valeur, et on détermine u_τ à partir de la loi laminaire. Au contraire, si la valeur de u_τ trouvée par la méthode de Brent correspond bien à $y_1^+ > y_c^+$, on conserve cette valeur comme solution finale
3. on détermine T_τ à partir de l'équation pour la température, qui est valable $\forall y_1^+$
4. on détermine finalement les flux pariétaux à imposer en utilisant les relations

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_w = \rho_w u_\tau^2 \\ q_w = T_\tau \rho_w C_{p,w} u_\tau \end{array} \right. \quad (4.6)$$

Il est important d'ajouter deux commentaires à cette séquence d'événements. Premièrement, une méthode de type Newton-Raphson peut aussi être utilisée à la première étape de l'algorithme.

Cette possibilité a été testée, révélant un temps d'inversion comparable pour l'obtention de la même solution. Cependant, en pratique, la méthode de Brent s'est avérée plus stable², ce qui a justifié son utilisation.

On précise également que les lois de parois décrites dans ce document sont développées en supposant que la capacité calorifique massique à pression constante reste constante dans la couche limite, en d'autres termes qu'elle ne dépend pas de la température. En pratique, on peut donc utiliser la valeur de son choix pour la quantité $C_{p,w}$ de l'équation (4.6). L'option qui a été retenue dans cette étude consiste à utiliser la valeur intégrale de C_p dans la première maille de paroi.

Pour terminer cette section, on présente sur la figure 4.3 la différence de comportement entre la loi de paroi couplée et la loi standard pour la vitesse. Sur cette figure, l'évolution de la fonction de paroi que doit résoudre la méthode de Brent (on cherche la valeur nulle de la différence entre le membre de droite et le membre de gauche de la seconde équation du système (4.5)) est représentée en fonction du frottement pariétal et du rapport de température T_1/T_w . Les solutions de l'équation sont représentées par le trait noir. On constate clairement que la loi de paroi standard pour la vitesse n'est pas sensible au gradient de température. Comme attendu, la fonction du système couplé n'est pas définie pour $T_1 = T_w$ ce qui justifie la bifurcation vers le modèle standard dans ce cas. On précise enfin que l'allure de la fonction couplée est monotone ce qui facilite la recherche des racines de l'équation.

4.2 Tests a posteriori

4.2.1 Données de référence, et définition du cas test

4.2.1.a) Données de référence

Afin d'évaluer le comportement du modèle il est essentiel d'utiliser des données de référence pour valider les deux critères d'intérêt : la valeur des flux pariétaux, et la forme générale des profils de vitesse et de température. On décide d'utiliser ici deux types de données : des simulations numériques directes pour les profils de vitesse et de température, et des corrélations empiriques pour la prédiction des flux pariétaux. Concernant les relations empiriques, nous utiliserons les corrélations présentées dans le premier chapitre, dans la section 1.3.1. Concernant les données DNS, il faut des configurations qui soient à nombre de Reynolds suffisamment élevé. La simulation de Hoyas & Jiménez [95] à $Re_\tau = 2000$ est une excellente référence pour tester la partie dynamique du modèle de paroi. Concernant le comportement du modèle avec différents nombres de Prandtl, on utilisera les DNS de Kawamura *et al.*³ [112, 111] à $Re_\tau = 640$ pour $Pr = 2, 5, 7, 10$,

²Suivant les conditions de l'écoulement, l'emploi de la méthode de Newton-Raphson conduisait à l'arrêt du calcul. Une première analyse rapide révèle en effet que dans son processus itératif la méthode de Newton-Raphson nécessite l'emploi de variables complexes, ce qui n'est pas nécessaire avec la méthode de Brent.

³Données accessibles en ligne : <http://murasun.me.noda.tus.ac.jp/turbulence/poi/poi.html>.

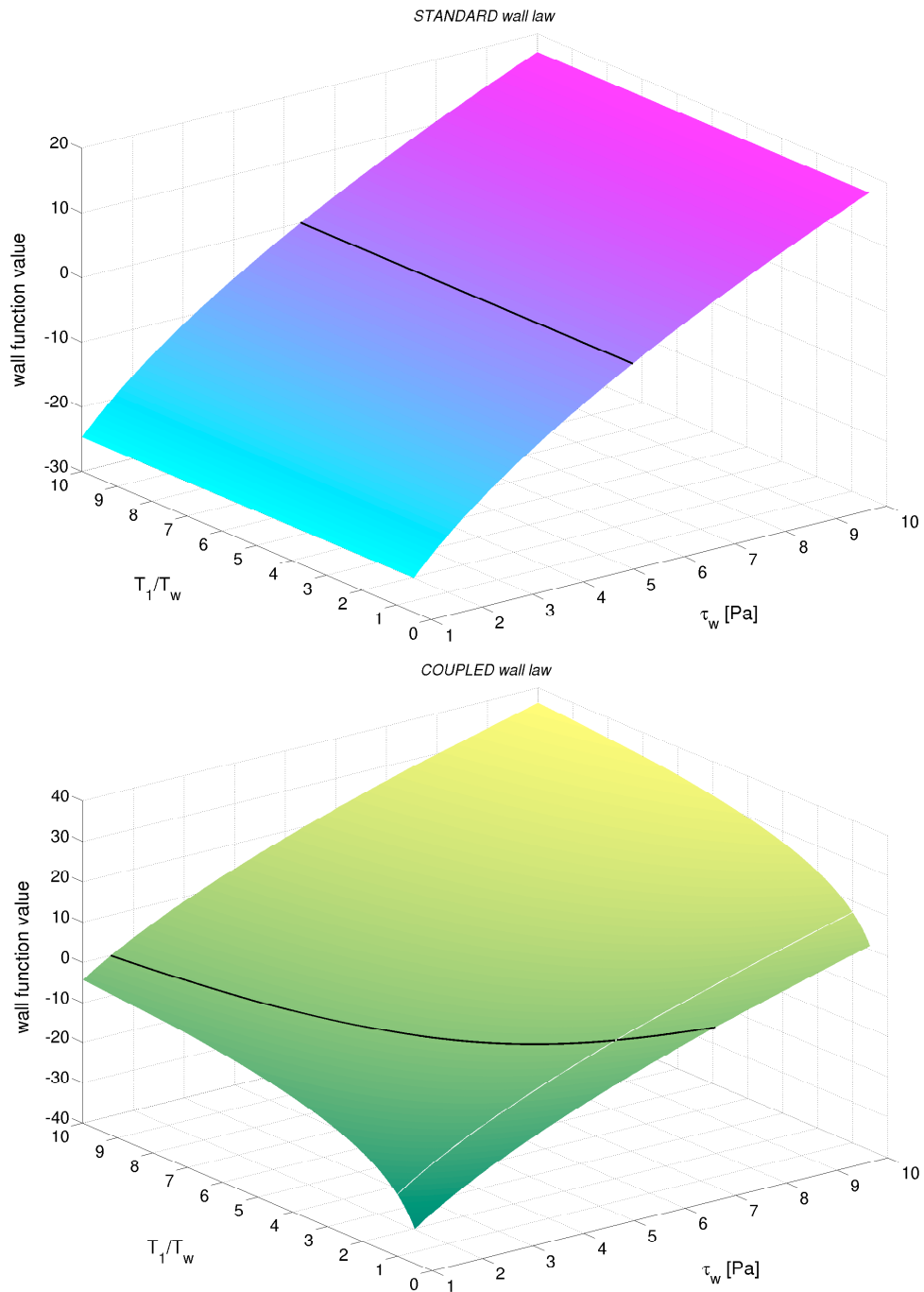


Figure 4.3 : Comportement de la loi de paroi standard (en haut) et de la loi couplée (en bas), en fonction du rapport de température T_1/T_w , et du frottement pariétal. La solution du système est représentée par le trait noir. Résultats obtenus en imposant, $y_1 = 1 \text{ mm}$, $u_1 = 40 \text{ m/s}$, $\rho_w = 1 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1.8 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$ et $T_w = 320 \text{ K}$.

et $Re_\tau = 1020$ pour $Pr = 0.71$. Il n'existe malheureusement pas de données aussi facilement accessibles pour étudier la variation des profils de vitesse et de température sous l'influence d'un gradient de température significatif. On se contentera donc de confronter les flux pariétaux aux corrélations empiriques (avec correction pour prendre en compte les variations de propriétés).

4.2.1.b) Définition du cas test

On met en place une série de simulations numériques d'écoulements en canal plan périodique pour tester le comportement *a posteriori* de la loi couplée. Avec cette configuration on se place naturellement dans un cas où de nombreuses hypothèses de la loi de paroi sont vérifiées : surface plane et lisse, écoulement développé dans la direction de l'écoulement, gradient de pression négligeable. Aussi, les écoulements simulés ont un nombre de Mach de l'ordre de 0.2 de façon à pouvoir négliger le terme d'échauffement visqueux.

Pour toutes les simulations, le rapport de forme du domaine de calcul est identique : $L_x = 4h$ dans la direction de l'écoulement, $L_y = 2h$ dans la direction normale à la paroi, et $L_z = 2h$ dans la direction transverse. La discrétisation spatiale est faite sur un maillage structuré (éléments hexaédriques), régulier dans les trois directions. Toutes les mailles ont donc le même rapport de forme dans le domaine de calcul. On précise que tous les calculs n'ont pas des cellules qui ont le même rapport de forme, ce qui peut avoir une influence quand on détermine la taille caractéristique du filtre de sous-maille. Pour que ce paramètre n'ait pas trop d'importance, nous avons utilisé un rapport longueur/largeur identique pour toutes les simulations, $l_x/l_z = 2$, et un rapport longueur/hauteur qui varie peu d'une simulation à l'autre, $1 < l_x/l_y < 2.7$.

Pour toutes les simulations, on utilise le code AVBP, avec un schéma Lax-Wendroff, le modèle de sous-maille de Smagorinsky [216], sans terme de viscosité artificielle. Les simulations sont initialisées avec un profil de vitesse turbulent moyen :

$$\bar{u}(y) = u_b^{\text{ref}} \frac{8}{7} \left(1 - \left|\frac{y}{h}\right|\right)^{1/7} \quad (4.7)$$

où u_b^{ref} est la valeur de la vitesse de mélange à laquelle on souhaite réaliser la simulation. A ce profil de vitesse on ajoute une perturbation aléatoire de 10% de la vitesse de mélange. Les autres composantes de la vitesse moyenne sont fixées à zéro, avec une perturbation aléatoire de 5% de u_b^{ref} . L'ajout de ces perturbations favorise la transition vers la turbulence de l'écoulement (d'une manière générale, la turbulence dans un canal périodique peut être déclenchée par les erreurs d'arrondi à précision machine [208], les erreurs numériques du schéma, ou par l'introduction d'une perturbation artificielle).

Le champ initial de température est constant en espace, et fixé à la température de paroi. De cette façon on évite la génération d'ondes entropiques qui peuvent se former si la température des points de paroi est trop éloignée de la valeur imposée par la condition limite quand on lance la simulation. Dans un code compressible comme AVBP, il faut en effet faire attention au

comportement acoustique d'une simulation, surtout dans le cas d'une configuration périodique où toute onde générée reste prisonnière dans le domaine de simulation.

Les termes de forçage sont des termes constants en espace, mais instationnaires. Pour le terme de la quantité de mouvement, on utilise une formulation dynamique qui rappelle l'écoulement vers un débit désiré, $\rho_b^{\text{ref}} u_b^{\text{ref}}$:

$$\mathcal{S}_x^{t+1} = \mathcal{S}_x^{\text{ref}} + \frac{\rho_b^{\text{ref}} u_b^{\text{ref}} - \frac{1}{V} \iiint_{\Omega} \rho^t u^t dV}{\tau_{\text{relax}}} \quad (4.8)$$

où \mathcal{S}_x^{t+1} est le terme source imposé à l'instant $t + \Delta t$, $\mathcal{S}_x^{\text{ref}}$ une constante en espace et en temps (l'utilisation de cette constante permet de faire converger le calcul plus rapidement, on pourra utiliser $\mathcal{S}_x^{\text{ref}} = \tau_w^{\text{estim}}/h$, avec τ_w^{estim} estimé à partir d'une corrélation empirique avant de lancer le calcul), le second membre du numérateur du terme de rappel représente l'intégrale volumique du débit à l'instant t , et τ_{relax} est une constante de temps de relaxation qui pourra par exemple être choisie comme $\tau_{\text{relax}} = 0.5h/u_\tau$.

Pour l'équation de l'énergie, on utilise un terme de forçage dynamique qui rappelle la température de mélange de la simulation vers une température de référence, T_b^{ref} :

$$\mathcal{Q}_x^{t+1} = \mathcal{Q}_x^{\text{ref}} + \frac{T_b^{\text{ref}} - \frac{1}{V} \iiint_{\Omega} \rho^t u^t T^t dV}{\tau_{\text{relax}}} \quad (4.9)$$

avec $\mathcal{Q}_x^{\text{ref}}$ une constante en espace et en temps qui accélère la convergence du calcul. Par exemple, on peut choisir $\mathcal{Q}_x^{\text{ref}} = -q_w^{\text{estim}}/h$, avec q_w^{estim} le flux de chaleur estimé à partir de corrélations empiriques avant de lancer le calcul.

L'intérêt de ces termes dynamiques (4.8) et (4.9) est double. D'une part, on maîtrise le nombre de Reynolds de mélange d'une simulation. Ceci facilite la comparaison avec des corrélations quand on fait varier le nombre de Prandtl moléculaire, ou le gradient de température. D'autre part, par rapport à l'emploi de termes de forçage constants, la phase transitoire du calcul est réduite car la simulation converge plus vite vers un état statistiquement stationnaire.

4.2.2 Tests pour les écoulements à faible gradient de température

Dans cette section on teste le comportement du modèle lorsque le gradient de température est négligeable. La température de paroi est imposée à $T_w = 320K$, et la température de mélange à $T_b = 350K$. Nous sommes donc dans un domaine d'utilisation où les lois de parois standards donnent des résultats très proches. Nous ne feront donc pas de comparaisons avec ces dernières.

Les simulations effectuées sont présentées dans la table 4.1. Elles couvrent plusieurs décades de nombres de Reynolds, pour des nombres de Prandtl moléculaires allant de 0.71 à 10. Plusieurs

simulation	Re_τ	Re_{b,D_h}	Pr	y_1^+	$n_x \times n_y \times n_z$
#1	320	2×10^4	0.71	10	$41 \times 61 \times 41$
#2	320	2×10^4	0.71	20	$31 \times 31 \times 31$
#3	320	2×10^4	0.71	30	$29 \times 21 \times 29$
#4	600	4×10^4	0.71	20	$41 \times 59 \times 41$
#5	600	4×10^4	0.71	30	$33 \times 41 \times 33$
#6	600	4×10^4	0.71	50	$33 \times 25 \times 33$
#7	1100	8×10^4	0.71	50	$41 \times 45 \times 41$
#8	1100	8×10^4	0.71	100	$25 \times 23 \times 25$
#9	1100	8×10^4	0.71	150	$21 \times 15 \times 21$
#10	2500	2×10^5	0.71	100	$33 \times 51 \times 33$
#11	2500	2×10^5	0.71	150	$33 \times 33 \times 33$
#12	4800	4×10^5	0.71	150	$33 \times 61 \times 33$
#13	4800	4×10^5	0.71	300	$33 \times 33 \times 33$
#14	4800	4×10^5	0.71	400	$33 \times 25 \times 33$
#15	4800	4×10^5	0.71	500	$33 \times 19 \times 33$
#16	21000	2×10^6	0.71	500	$41 \times 81 \times 41$
#17	21000	2×10^6	0.71	1000	$41 \times 41 \times 41$
#18	2500	2×10^5	0.2	150	$33 \times 33 \times 33$
#19	2500	2×10^5	0.6	100	$33 \times 51 \times 33$
#20	2500	2×10^5	0.8	100	$33 \times 51 \times 33$
#21	2500	2×10^5	0.9	100	$33 \times 51 \times 33$
#22	2500	2×10^5	1	100	$33 \times 51 \times 33$
#23	2500	2×10^5	1	150	$33 \times 33 \times 33$
#24	2500	2×10^5	1.1	100	$33 \times 51 \times 33$
#25	2500	2×10^5	1.1	150	$33 \times 33 \times 33$
#26	2500	2×10^5	2	100	$33 \times 51 \times 33$
#27	2500	2×10^5	2	150	$33 \times 33 \times 33$
#28	2500	2×10^5	5	100	$33 \times 51 \times 33$
#29	2500	2×10^5	5	150	$33 \times 33 \times 33$
#30	2500	2×10^5	7	100	$33 \times 51 \times 33$
#31	2500	2×10^5	7	150	$33 \times 33 \times 33$
#32	2500	2×10^5	10	100	$33 \times 51 \times 33$
#33	2500	2×10^5	10	150	$33 \times 33 \times 33$

Table 4.1 : Calculs effectués pour tester la loi de paroi couplée. Pour tous les cas, la température de paroi est fixée à $T_w = 320K$, la température de mélange à $T_b = 350K$, la variation de température reste donc faible $T_b/T_w = 1.1$. Les rapports de forme du domaine de calcul sont identiques pour tous les cas : $L_x = 4h$, $L_y = 2h$, $L_z = 2h$.

positions du premier point de calcul ont été testées, aussi bien dans la zone tampon que dans la région inertielle.

On commence par étudier l'allure générale des profils obtenus. La figure 4.4 (en haut) montre les profils de vitesse en unités pariétales, pour différents nombres de Prandtl, au même nombre de Reynolds, avec un premier point situé à la même distance. On constate qu'il n'y a pas de différences entre tous ces profils : le premier point de paroi tombe bien sur le profil logarithmique ce qui indique la bonne implémentation de la loi. On constate ensuite un bon accord général avec le profil de référence de Hoyas & Jiménez (le léger décollement à partir du second point de calcul est un comportement classique qui résulte de l'utilisation d'une loi de paroi dans un code LES [180]). La figure 4.4 (en bas) présente les profils de température en fonction du nombre de Prandtl. On constate là aussi un très bon accord avec les DNS de Kawamura *et al.* [112, 111].

Le comportement statistique de l'écoulement est illustré par la figure 4.5. Le cas-test #11 est utilisé pour étudier le comportement dynamique et le cas #8 pour le comportement thermique (ces deux cas sont respectivement au même Re_τ que les DNS de Hoyas & Jiménez et Kawamura *et al.*). On retrouve assez bien les statistiques du premier ordre dans la zone pleinement turbulente. Près de la paroi, on constate une zone d'adaptation sur les trois premiers points de calcul : des structures non-physiques apparaissent à cause du manque de résolution spatiale ce qui s'accompagne de pics de fluctuations mal positionnés et de mauvaise amplitude. C'est un problème habituellement rencontré avec l'utilisation d'une loi de paroi dans une LES [180]. On remarquera également le bon accord des simulations en termes de fluctuation de pression.

Pour terminer cette section, les flux pariétaux fournis par la loi de paroi couplée sont confrontés à des corrélations empiriques. La figure 4.6 présente l'évolution du coefficient de frottement en fonction du nombre de Reynolds. Le modèle de paroi se comporte bien sur plusieurs décades de nombres de Reynolds, et ceci quelle que soit la position du premier point de calcul. Le seul point qui sort nettement de la courbe correspond à la simulation #9 pour laquelle nous n'avons que 15 points dans la hauteur du canal. Il s'agit d'une situation où $y_1/h > 0.1$, ce qui ne correspond pas à la pratique d'utilisation préconisée précédemment (l'hypothèse de longueur de mélange n'est plus valable à cet endroit). On constate également que le modèle se comporte bien, même quand le premier point se situe dans la zone tampon (cas-tests #1 à #5).

Sur la figure 4.7 on montre l'évolution du nombre de Nusselt en fonction du nombre de Reynolds de film. On constate là aussi un excellent accord avec les prédictions annoncées par les corrélations empiriques.

La figure 4.8 indique finalement que la loi de paroi couplée donne une excellente prédiction du flux de chaleur quel que soit le nombre de Prandtl moléculaire.

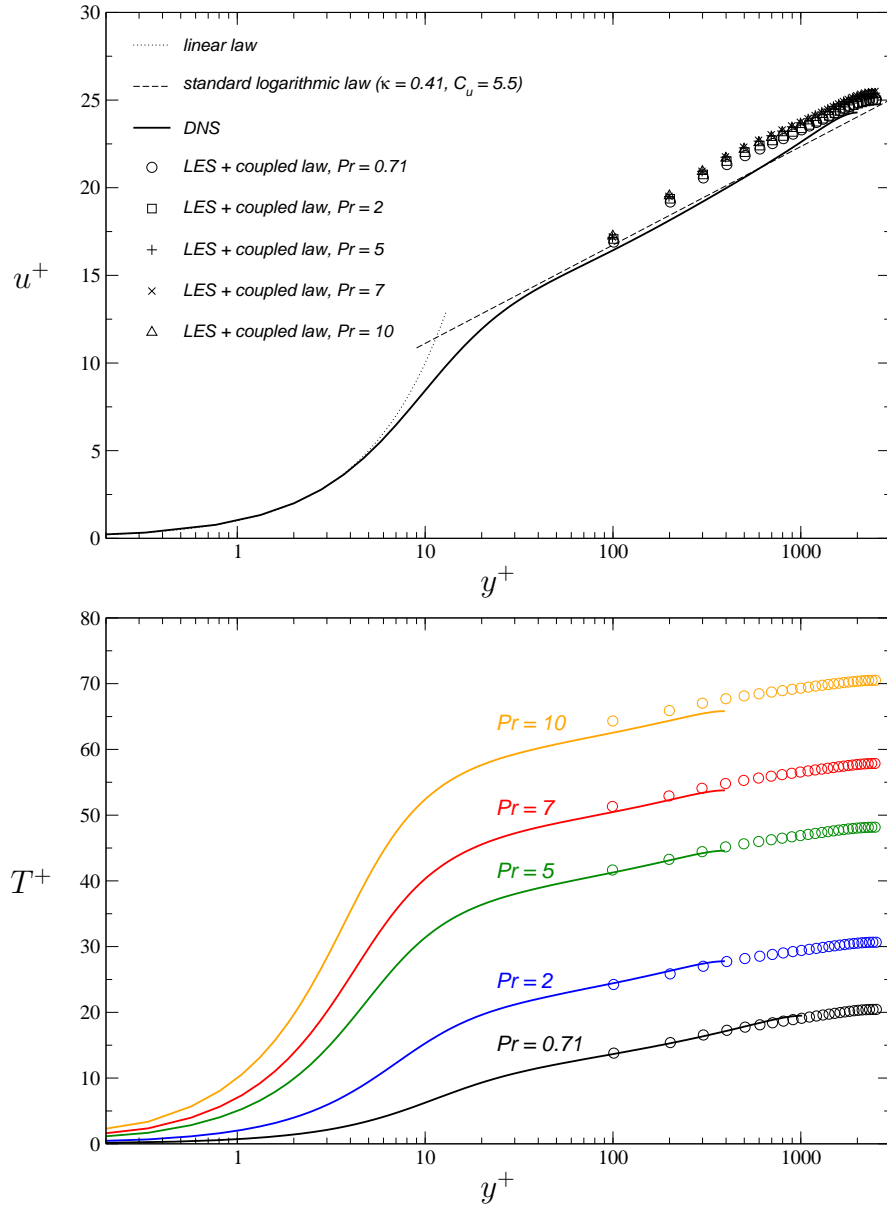


Figure 4.4 : Comparaison des profils obtenus avec la loi de paroi couplée pour différents nombres de Prandtl. Profils de vitesse en unités pariétales (en haut). Profils de température en unités pariétales (en bas). Traits pleins : DNS de référence, Hoyas & Jiménez [95], Kawamura et al. [112, 111]. Symboles : LES avec loi de paroi couplée (position du premier point, $y_1^+ \approx 100$).

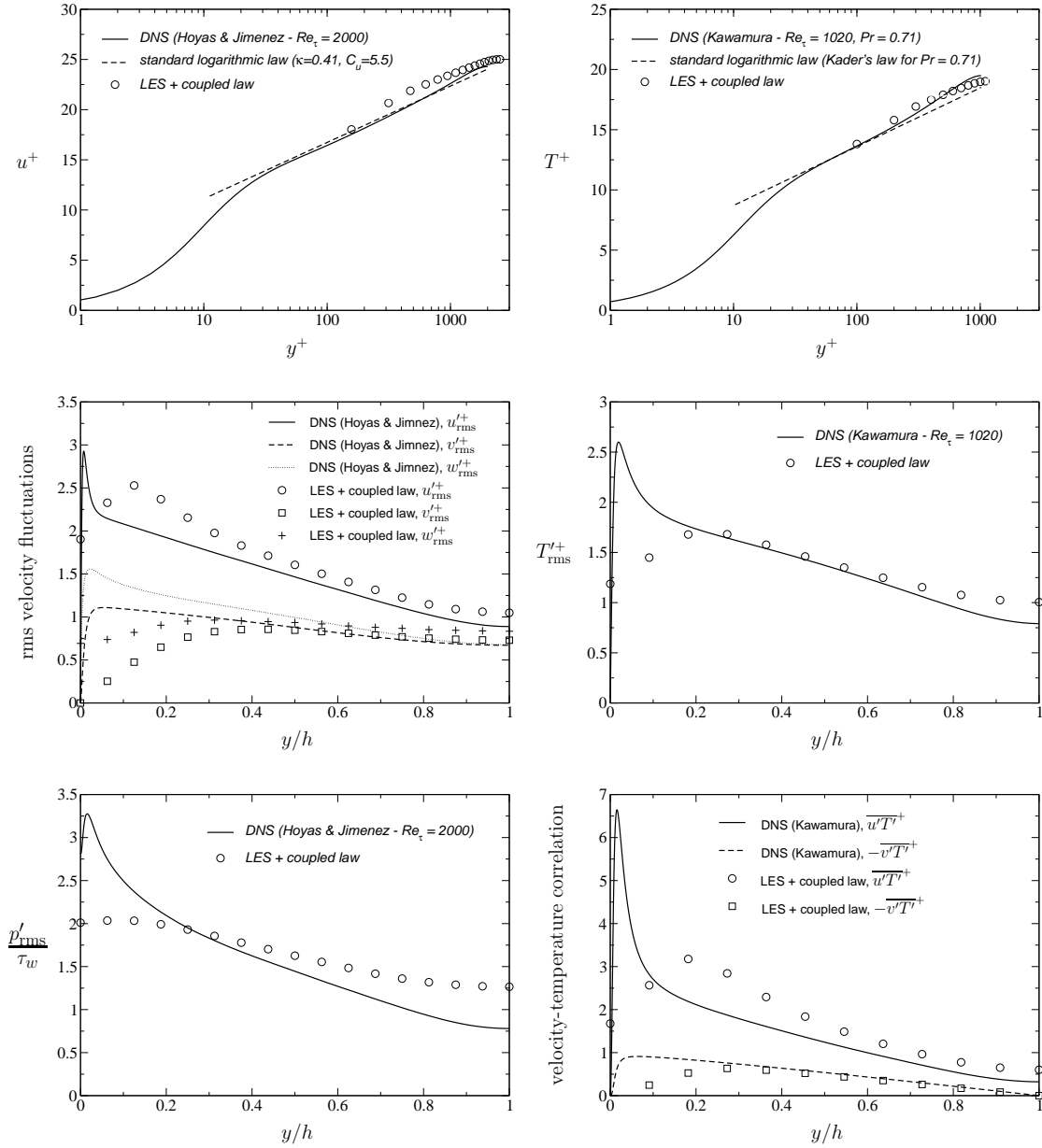


Figure 4.5 : Comportement dynamique du modèle de paroi couplée (cas #11), comparé aux données de Hoyas & Jiménez [95] (à gauche). Comportement thermique de la loi de paroi couplée (cas #8), comparé aux données de Kawamura et al. [112, 111] (à droite).

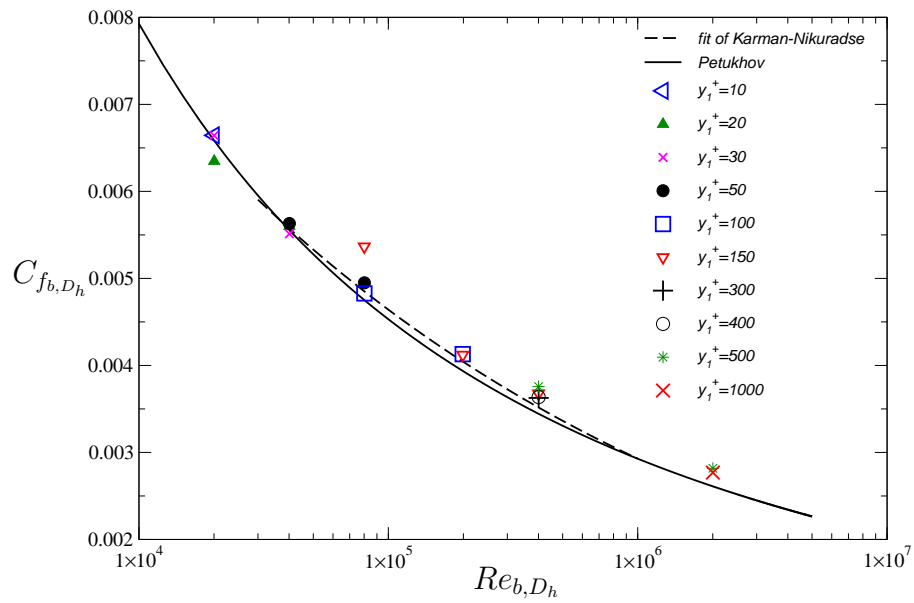


Figure 4.6 : Coefficient de frottement en fonction du nombre de Reynolds de mélange. Calculs isothermes ($T_b/T_w = 1.1$)

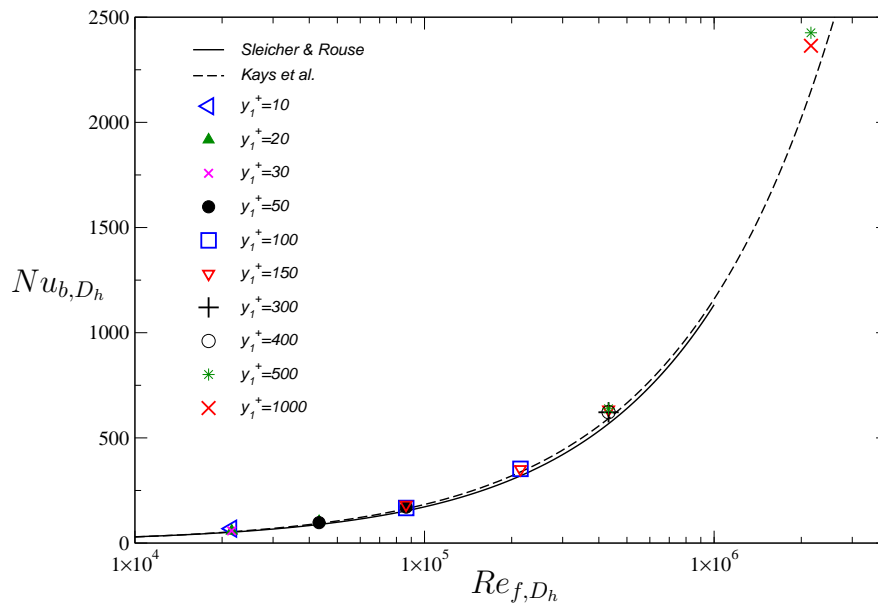


Figure 4.7 : Nombre de Nusselt en fonction du Reynolds de film. Calculs isothermes ($T_b/T_w = 1.1$)

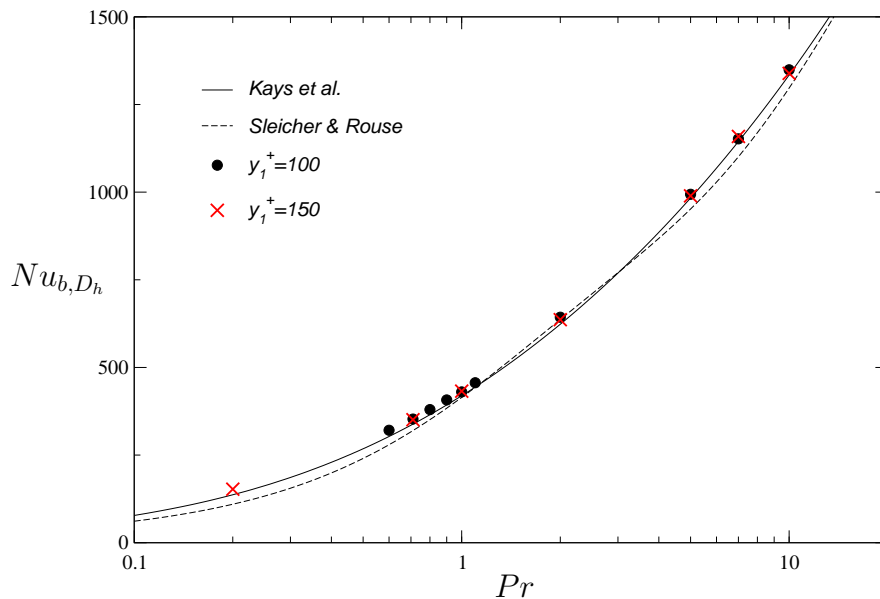


Figure 4.8 : Nombre de Nusselt en fonction du nombre de Prandtl moléculaire. Calculs isothermes ($T_b/T_w = 1.1$), le nombre de Reynolds de film est identique, $Re_{f,D_h} = 214700$.

Cette série de tests confirme la bonne implémentation de la loi de paroi dans le code de calcul, et indique que la loi couplée est capable de délivrer une estimation correcte des flux pariétaux. Nous avons aussi observé que la loi de paroi, combinée avec une approche LES, peut fournir des résultats tout à fait convenables concernant les profils moyens de vitesse et de température, ainsi que pour les grandeurs fluctuantes. Ces résultats valent pour une situation où le gradient de température est faible, avec des variations de masse volumique négligeables. L'utilisation d'une loi de paroi classique devrait donc mener aux mêmes résultats.

4.2.3 Tests pour les écoulements dilatables, à gradient de température significatif

Afin d'illustrer les avantages de la loi couplée, on présente dans cette section une série de calculs en situations anisothermes. La table 4.2 récapitule les paramètres utilisés pour chacun des cas. Une large gamme de rapports de température est examinée, $0.5 < T_b/T_w < 5$. On étudie aussi bien des situations où le fluide réchauffe la paroi, que des situations où il la refroidit.

Pour la plage de température étudiée, il n'existe pas de données expérimentales ou numériques de référence. On se contente donc d'examiner les profils de vitesse et de température de manière qualitative. L'analyse se concentre principalement sur les différences entre les résultats de la loi couplée et ceux de la loi standard.

simulation	Re_τ	Re_{b,D_h}	T_w	T_b	T_b/T_w	y_1^+	$n_x \times n_y \times n_z$
#34	1700	4×10^5	650K	320K	0.5	100	$33 \times 33 \times 33$
#35	2300	4×10^5	500K	320K	0.64	150	$33 \times 33 \times 33$
#36	1500	1.8×10^5	400K	320K	0.8	100	$33 \times 33 \times 33$
#37	1800	1.8×10^5	350K	320K	0.9	100	$33 \times 33 \times 33$
#38	5700	2×10^5	320K	660K	2	150	$51 \times 71 \times 51$
#39	9200	2×10^5	320K	950K	3	250	$51 \times 71 \times 51$
#40	12900	2×10^5	320K	1280K	4	350	$51 \times 71 \times 51$
#41	16800	2×10^5	320K	1600K	5	500	$51 \times 71 \times 51$

Table 4.2 : Calculs effectués pour tester la loi de paroi couplée. Écoulements anisothermes, gradient de température significatif. Le nombre de Prandtl moléculaire vaut $Pr = 0.71$ pour toutes les simulations. Les rapports de forme du domaine de calcul sont identiques pour tous les cas : $L_x = 4h$, $L_y = 2h$, $L_z = 2h$.

Les profils de vitesse sont tracés sur la figure 4.9. Avec la loi couplée, les profils sont beaucoup plus hétérogènes et s'écartent clairement du profil de référence $T_b/T_w = 1$. On constate également qu'avec la loi couplée le premier point de calcul tombe assez loin de la loi standard. Les points qui suivent prennent sans attendre la direction d'une loi logarithmique ce qui est un bon indicateur de la qualité des résultats. Au contraire, avec la loi standard les profils commencent tous sur la loi classique et ne tiennent pas du tout leur comportement logarithmique. Ce constat est d'autant plus visible que le rapport de température T_b/T_w est grand. Les profils de température présentés sur la figure 4.10 conduisent aux mêmes conclusions.

Les figures 4.11 et 4.12 apportent des informations quantitatives concernant la prédiction des flux pariétaux. Que l'écoulement soit réchauffé ou refroidi, la loi couplée semble prédire assez fidèlement le coefficient de frottement. L'erreur par rapport à la corrélation de Kármán-Nikuradse (avec correction pour propriétés variables) reste inférieure à 15% sur toute la gamme étudiée. En revanche, la loi de paroi standard commet une erreur de plus en plus importante quand on s'écarte d'une situation isotherme (l'erreur atteint 80% pour $T_b/T_w = 5$).

Le constat est identique concernant la prédiction du flux de chaleur. L'erreur de la loi couplée se stabilise autour de 5% alors que celle de la loi standard atteint 50% pour $T_b/T_w = 5$. Sur la figure 4.12, les deux corrélations empiriques utilisées fournissent des erreurs opposées ce qui laisse penser que le modèle couplé commet en réalité moins de 5% d'erreur.

On constate enfin que ces tests *a posteriori* donnent des estimations semblables aux tests *a priori* effectués dans le chapitre 2. C'est un résultat intéressant qui confirme la fiabilité des tests *a priori*, et conforte la validité du modèle de paroi multi-espèces réactif développé dans le chapitre 2.

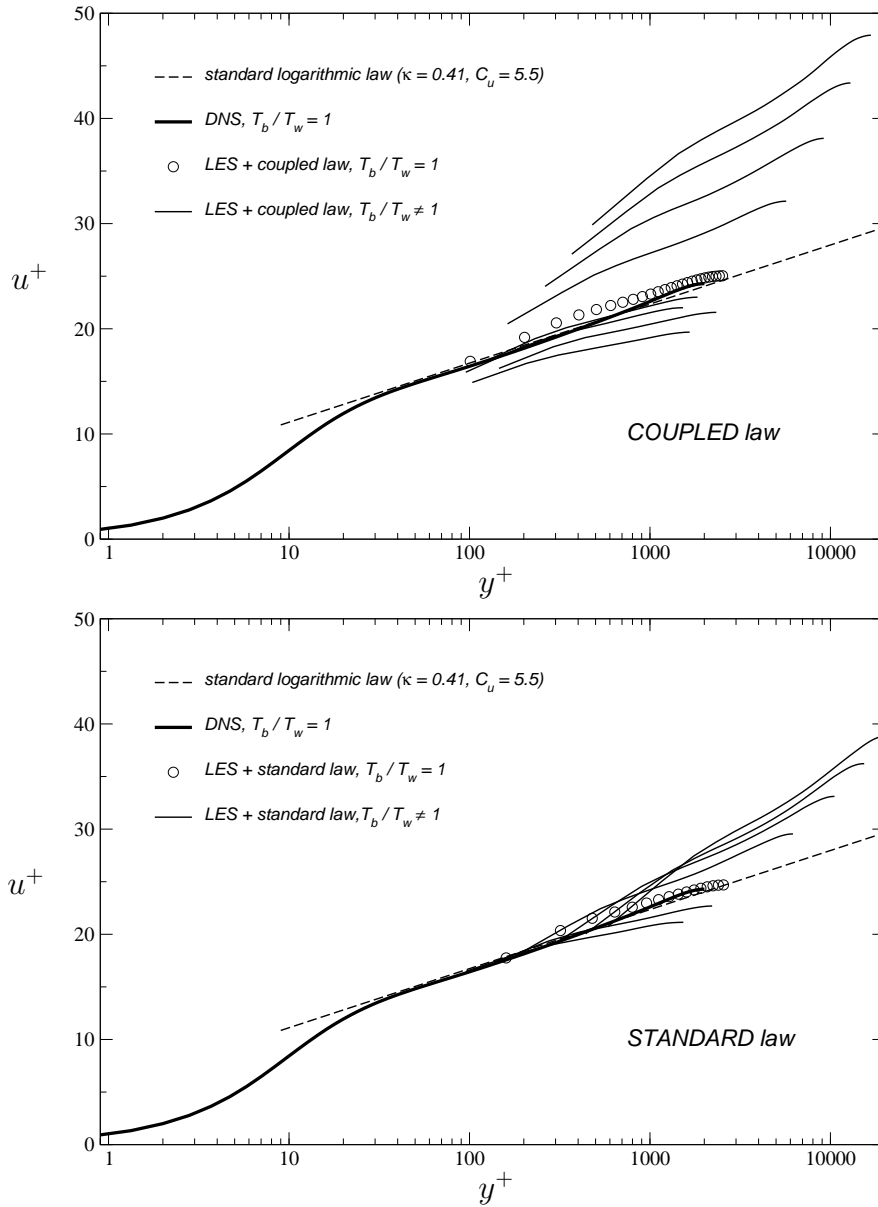


Figure 4.9 : Profils de vitesse en unités pariétales. (en haut) LES avec la loi de paroi couplée pour les rapports de température $T_b/T_w = 0.5, 0.64, 0.8, 0.9, 2, 3, 4, 5$, de bas en haut. (en bas) LES avec la loi de paroi standard pour les rapports de température $T_b/T_w = 0.5, 0.64, 2, 3, 4, 5$, de bas en haut. On positionne également la DNS de Hoyas & Jiménez [95] comme référence.

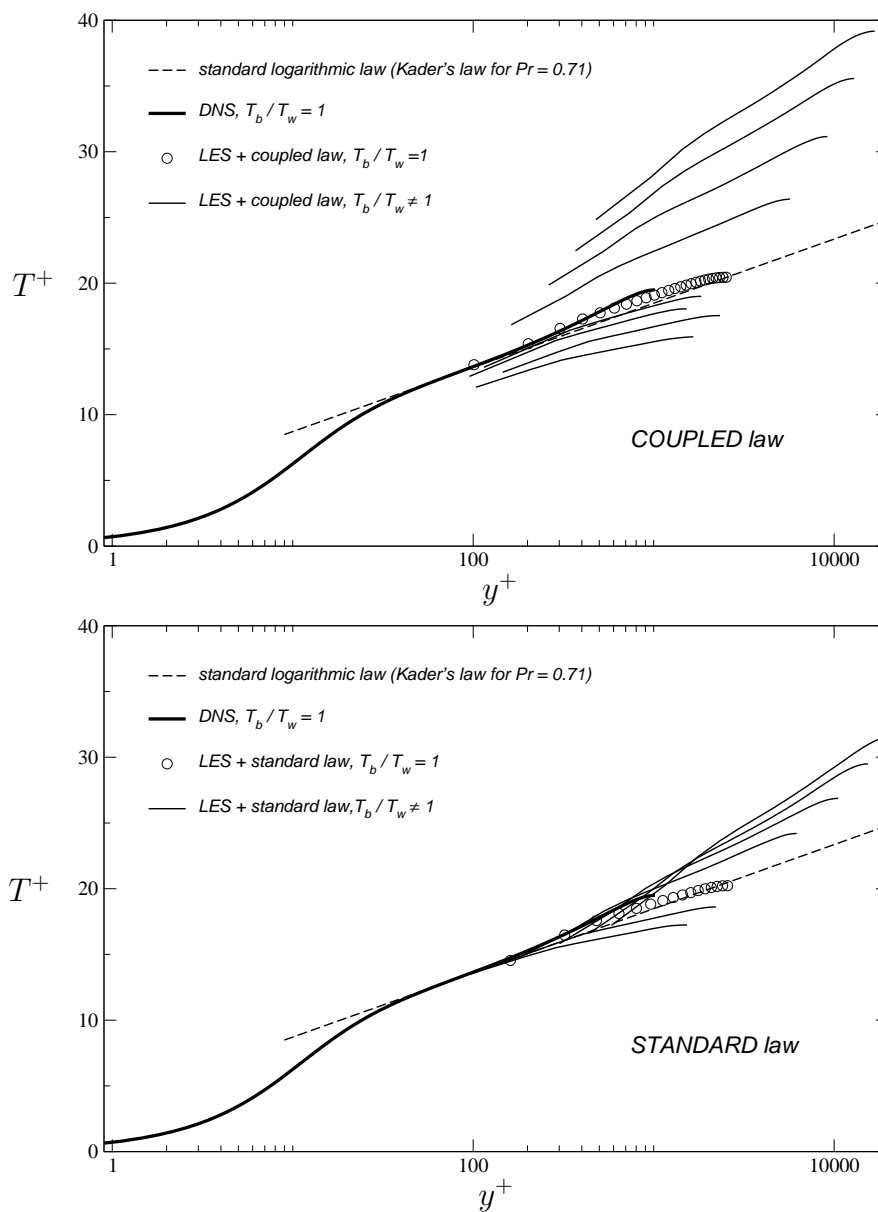


Figure 4.10 : Profils de température en unités pariétales. (en haut) LES avec la loi de paroi couplée pour les rapports de température $T_b/T_w = 0.5, 0.64, 0.8, 0.9, 2, 3, 4, 5$, de bas en haut. (en bas) LES avec la loi de paroi standard pour les rapports de température $T_b/T_w = 0.5, 0.64, 2, 3, 4, 5$, de bas en haut. On positionne également la DNS de Kawamura [112, 111] comme référence.

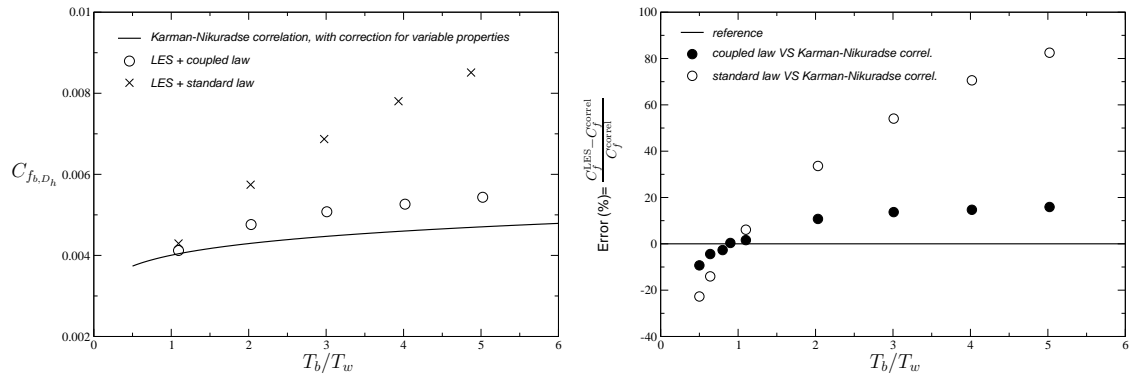


Figure 4.11 : Coefficient de frottement en fonction du rapport de température. A gauche, on compare les résultats avec la relation de Kármán Nikuradse pour un nombre de Reynolds de mélange $Re_{b,D_h} = 200000$. A droite, on présente la comparaison sous forme d'erreur car toutes les simulations ne sont pas au même nombre de Reynolds.

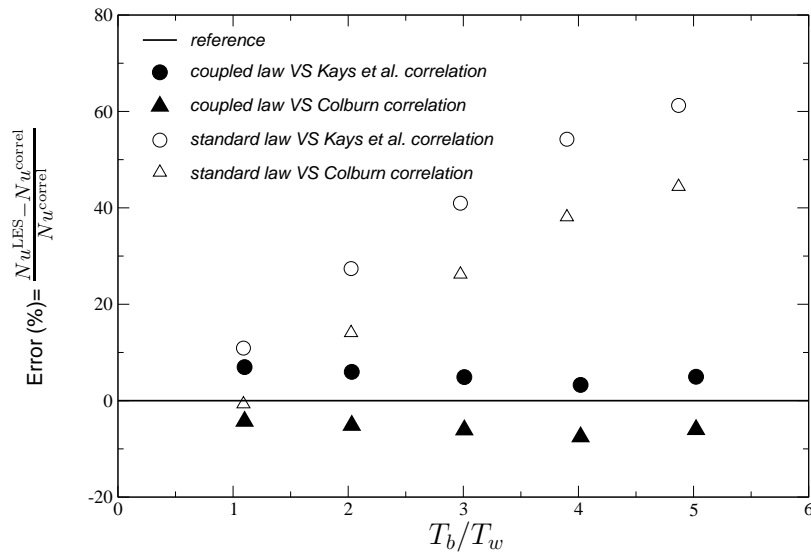


Figure 4.12 : Nombre de Nusselt en fonction du rapport de température. On présente la comparaison sous forme d'erreur car toutes les simulations ne sont pas au même nombre de Reynolds.

La loi de paroi couplée présente donc un avantage indéniable car elle couvre une gamme plus large d'applications. De plus, son coût d'utilisation est strictement identique à celui d'une loi standard car l'algorithme de résolution converge rapidement (une dizaine d'itération).

Deuxième partie

Modélisation des flux pariétaux sur une tuyère à paroi ablatée

Description analytique des écoulements laminaires de couche limite avec ablation des parois

La caractérisation des écoulements de couche limite sur paroi ablatable reste marginale dans la littérature. On trouve très peu d'études de référence à ce sujet, la plupart des travaux sont appliqués à des configurations industrielles bien définies et ne renseignent que sur le comportement global du couple fluide/structure.

Ce constat complique le processus de validation des écoulements qu'on simule dans cette partie. Il paraît donc indispensable de définir un cas de référence qui permette de valider la méthode numérique retenue, et notamment la condition à la limite développée pour traduire l'ablation des parois (voir le chapitre 6, section 6.2.2, pour une brève présentation). Pour cette raison, une solution analytique pour un écoulement laminaire sur paroi ablatable est dérivée dans ce chapitre.

Ce travail a fait l'objet d'un article soumis dans le journal *Physics of Fluids* sous la forme d'une lettre. Cette approche permet d'appréhender le problème de l'ablation sous un angle analytique, et de comprendre les différents paramètres qui pilotent ce phénomène. Cette article est inclus ci-après. Dans un deuxième temps, on repasse en français pour confronter la solution analytique avec les résultats d'une simulation effectuée avec les méthodes numériques d'AVBP et la condition à la limite spécialement développée pour ce travail.

article submitted as a **letter in Physics of Fluids**

Analytical solution for wall-bounded flow with thermo-chemical ablation

Olivier Cabrit¹
CERFACS,
42 avenue Gaspard Coriolis,
31057 Toulouse, France

Guillaume Moula & Olivier Simonin
Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT),
1 allée du Professeur Camille Soula,
31400 Toulouse, France

Franck Nicoud
Université Montpellier 2,
UMR CNRS 5149 / CC51,
Place Eugène Bataillon,
34095 Montpellier, France

abstract

The steady, laminar two-dimensional analytical solution of a multicomponent compressible binary mixture flowing over a surface undergoing thermo-chemical ablation is presented. A special attention is given to the configuration set-up which allows to tackle the unsteady characteristic of surface recession. The idea consists in considering a channel problem in which a surface is the lieu of ablation process whereas the other one is the lieu of deposition. No specific assumption is made concerning the nature of the species involved in the problem. Within this framework, the density/velocity/concentration profiles are derived, and discussed for three particular cases.

Analytical solutions of the compressible multicomponent Navier-Stokes equations is most of the time difficult to establish mainly because of the complex nature of the flow (due for instance to unsteady behavior, turbulence, chemical reactions or multicomponent transport properties), or because the boundary conditions of the problem can be geometrically and physically very difficult to integrate into the analytical solution. When the analytical solution is tractable, it can be used to better understand the physics and easily analyze the influence of some physical parameters onto the studied phenomena. Moreover, analytical solutions are of wide interest for experimentalists or computational fluid dynamics users to validate their experimental/numerical procedure.

For simple two-dimensional laminar flows it is sometimes possible to find the analytical solution of the system of partial differential equations that governs the physics. For instance, the well-know Poiseuille flow configuration allows to give the analytical velocity/temperature profiles under the assumption of streamwise-developed steady flow [203]. Introducing the transpiring surface effects, Koh and Hartnett [126] have shown that the analytical solution can also be recovered for flow over permeable wedges. Hamza [87] also presented the solution of channel flow with transpiring and moving walls for biomechanics-fluid interest. Concerning reacting wall effects, Rosner [198] introduced a set of solutions for surface catalyzed problems. Duan and Martín [68] also make use of an analytical solution for a diffusion-tube sidearm reactor in order to validate their numerical simulation of airflow over purely catalytic wall. To our knowledge, surface ablation has received little attention in the literature. Libby & Blake [139] developed an analytical solution for ablation but their case of study was purely diffusive : study of a carbon spherical particle interacting with a frozen flow.

The surface ablation problem can be seen as a combination between the transpiring surface and catalysis effects. Indeed, contrary to a catalytic wall, the ablative surface has an effect on the flow because the products of the heterogeneous reactions include atoms that were originally embedded in the wall lattice. As a consequence, the surface geometry is changed according to the reaction rates at the surface. This feature makes the derivation of the solution more challenging, especially when a steady state solution is sought for. As presented hereafter, the configuration set-up has to be properly thought to handle this undesirable effect.

To simply the derivation, one seeks for a solution that satisfies the following assumptions:

- two-dimensional laminar flow,
- steady state,
- channel flow developed in streamwise direction (periodic boundary conditions),
- non-reacting binary mixture,
- constant Schmidt numbers,
- pure ablation (no pyrolysis or sublimation of the wall material),
- isothermal ablated surface with finite reaction rates,
- constant pressure and temperature.

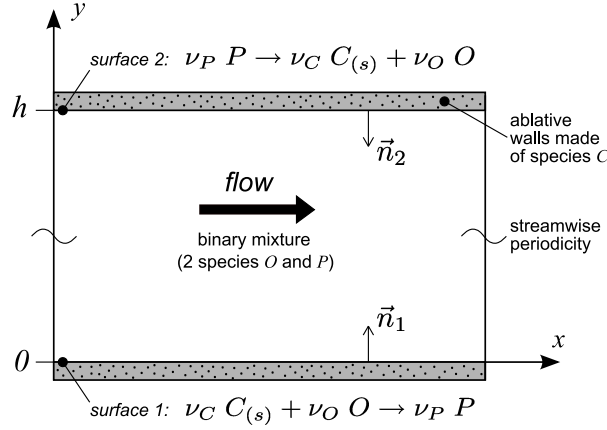


Figure 5.1 : Sketch of the configuration.

In such a configuration, a special attention must be given to the chemical scheme retained for the heterogeneous surface reactions. Indeed, if the same scheme is applied to the two surfaces, this leads to a flow that similarly behaves at the wall surfaces. This means that the two convective wall normal velocity vectors induced by surface ablation are pointing towards opposite directions. This translates into a mass increasing (or decreasing) configuration, not compatible with the steady state assumption. For this reason, one sets up a configuration in which one of the surface is the lieu of an oxidation scheme while the facing surface is the lieu of the reverse reaction. In others words, one of the surface is subjected to ablation whereas the other to deposition in such a way that the distance between the two surfaces remains constant.

The set-up retained is summarized in Fig. 5.1. The flow is supposed to evolved in a streamwise periodic channel between two plates separated by the distance h . The wall normal direction is referenced by the letter y whereas x is used for the streamwise direction. Making use of the assumption of steady developed non-reacting flow, one can write the multicomponent Navier-Stokes mass/species/momentum conservation equations as:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (\rho (v + V_{k,y}) Y_k) = 0, \quad k \in \{1, 2\} \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \mathcal{S} \quad (5.3)$$

where ρ denotes the density, u the streamwise velocity component, v the wall normal velocity component, Y_k the mass fraction of species k , $V_{k,y}$ the wall normal diffusion velocity of species k , $\tau_{xy} = \mu du/dy$ the shear stress, and \mathcal{S} is the source term driving the flow. Note that this term must be added because the periodicity condition along x imposes $\partial p/\partial x = 0$. Note that

the wall normal momentum conservation is not presented here because it does not give useful information to determine the solution. Also, the energy conservation equation does not appear since the temperature is supposed constant. Finally, the perfect gas equation of state is used to close the problem, which supposes that no real gas effects are considered:

$$\frac{p}{\rho} = \frac{R}{W}T \quad (5.4)$$

where R stands for the perfect gas constant and W the mean molecular weight of the mixture. The relation between W and Y_k is so that $1/W = \sum_k Y_k/W_k$, with W_k the atomic weight of species k . Equivalently, W can be expressed as a function of the molar fractions X_k , $W = \sum X_k W_k$. Under the conditions described in Fig. 5.1, one seeks for an analytical solution for the independent variables $\rho(y)$, $u(y)$, $v(y)$, $Y_k(y)$ (or equivalently $X_k(y)$ via the relation $X_k = Y_k W/W_k$).

In the following, the letter C , O and P denote the solid wall species (which could be for instance solid carbon), the gaseous oxidizing species and the gaseous species produced by ablation, respectively. The associated stoichiometric coefficients are noted ν_C , ν_O and ν_P . According to these notations, the following chemical schemes are applied to the surface 1 (lieu of ablation):



and to the surface 2 (lieu of deposition):



In what follows, variables subscripted by letters C , O and P refer to the associated species and subscript numbers 1 and 2 refer to space location, $y = 0$ and $y = h$, respectively. The molar progress rate of reaction 1, \mathcal{Q}_1 , can then be modeled as follows:

$$\mathcal{Q}_1 = \left(\frac{Y_{O,1}}{W_O} \rho_1 \right)^{\nu_O} K_1 = \left(X_{O,1} \frac{p}{RT} \right)^{\nu_O} K_1 \quad (5.7)$$

where K_1 represents the rate of reaction 1 which can be modeled by an Arrhenius law for instance. However, in the present framework it is not necessary to go deeper in the modeling of this coefficient because one assumes a constant temperature implying that K_1 can be merely seen as a parameter of the problem. Similarly, one can write the molar progress rate of reaction 2 as:

$$\mathcal{Q}_2 = \left(\frac{Y_{P,2}}{W_P} \rho_2 \right)^{\nu_P} K_2 = \left(X_{P,2} \frac{p}{RT} \right)^{\nu_P} K_2 \quad (5.8)$$

Moreover, the general formulation of species conservation balance at the reacting surfaces reads:

$$\left(\rho_j \vec{u}_j Y_{k,j} + \rho_j \vec{V}_{k,j} Y_{k,j} \right) \cdot \vec{n}_j = \dot{s}_{k,j} \quad (5.9)$$

where \vec{u}_j and $\vec{V}_{k,j}$ represent the convection and diffusion velocity vectors of species k estimated at surface j , \vec{n}_j is the unitary wall normal vector at surface j directed towards the gaseous domain

(see Fig. 5.1), and $\dot{s}_{k,j}$ is the mass production rate of species k defined as $\dot{s}_{k,j} = \overline{\nu_{k,j}} W_k Q_j$ with $\overline{\nu_{k,j}}$ the algebraic stoichiometric coefficient of species k at surface j (positive for produced species, negative for consumed species). Finally, the species conservation balance at surface 1 reads:

$$\rho_1 v_1 Y_{k,1} + \rho_1 V_{k,1} Y_{k,1} = \dot{s}_{k,1} \quad (5.10)$$

and at surface 2:

$$\rho_2 v_2 Y_{k,2} + \rho_2 V_{k,2} Y_{k,2} = -\dot{s}_{k,2} \quad (5.11)$$

Summing over all the species and making use of the mass conservation constraints $\sum_k Y_k = 1$ and $\sum_k Y_k V_k = 0$, one obtains the two relations $\rho_1 v_1 = \sum_k \dot{s}_{k,1}$ and $\rho_2 v_2 = -\sum_k \dot{s}_{k,2}$. Furthermore, the continuity equation (5.1) imposes that $\rho(y)v(y)$ is constant (in the forthcoming the notation $\dot{m} = \rho(y)v(y)$ will be used). As a consequence, one finds that $\dot{m} = \sum_k \dot{s}_{k,1} = -\sum_k \dot{s}_{k,2}$ which leads to the relation $Q_1 = Q_2$ (the notation $Q = Q_j$ is thus retained for simplification). The two progress rates of the surface reactions are thus identical. The relation between the wall normal mass flow rate and the progress rate of reaction is thus expressed as:

$$\dot{m} = Q(\nu_P W_P - \nu_O W_O) \quad (5.12)$$

When the species diffusion due to pressure gradients, temperature gradients (Soret effect) and volume forces are neglected, the binary diffusion between the two species O and P can be modeled by the classical relation [92] $V_k Y_k = -\mathcal{D}_{OP}^{\text{bin}} \partial Y_k / \partial y$, where $\mathcal{D}_{OP}^{\text{bin}} = \mathcal{D}_{PO}^{\text{bin}}$ is the binary diffusion coefficient. Another formulation is obtained by considering equivalent diffusion coefficients, D_k , that represents the diffusion of species k into the mixture and expressed as $D_k = (1 - Y_k) / (\sum_{l \neq k} X_l / \mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}})$. This leads to an equivalent diffusion model which now involves the species molar fractions instead of their mass fractions, $V_k X_k = -D_k dX_k / dy$. One recalls here that when a binary mixture is considered, it is not necessary to include a correction velocity in the model to insure mass conservation [80]. This presents a strong advantage for solving the system of equations. Note also that contrary to the binary coefficient, D_k is depending on the local concentration of each species which means that $D_k = D_k(y)$. According to the previous definitions, the following relation stands for the present mixture:

$$D_O W_O = D_P W_P \quad (5.13)$$

Moreover, the dynamic viscosity for gases is usually assumed to be solely temperature dependent which means that in the present isothermal framework μ is a constant. Since the Schmidt numbers, $Sc_k = \mu / (\rho D_k)$, are assumed to be constant, we find that $\rho(y) D_k(y)$ is also constant. This statement allows to simplify the integration of the forthcoming partial differential equations.

In order to determine the species concentration profiles, one may concentrate on the variable X_O and to deduce the concentration of species P by the relation $X_P = 1 - X_O$. At this step, it is important to consider molar fractions instead of mass fractions because it leads to a first order partial differential equation with constant coefficients. Indeed, making use of Eq. (5.2), integrating

once and identifying with Eq. (5.10), rearranging in terms of molar fractions, and making use of $\rho(y)D_O(y) = \mu/S_{cO}$ yields:

$$\eta X_O - \frac{\mu}{S_{cO}} \frac{dX_O}{\dot{m} dy} = \frac{\nu_O W_P}{\nu_O W_O - \nu_P W_P} \quad (5.14)$$

with

$$\eta = \frac{W_P(\nu_O - \nu_P)}{\nu_O W_O - \nu_P W_P} \quad (5.15)$$

Since $\eta = 0$ for $\nu_O = \nu_P$, the integration of this differential equation leads to two solutions depending on the values taken by ν_O and ν_P :

$$\begin{cases} X_O(y) = \left(X_{O,1} - \frac{\nu_O}{\nu_O - \nu_P} \right) \exp \left[\eta \frac{S_{cO} \dot{m}}{\mu} y \right] + \frac{\nu_O}{\nu_O - \nu_P}, & \text{for } \nu_O \neq \nu_P \\ X_O(y) = - \frac{S_{cO} \dot{m}}{\mu} \frac{W_P}{W_O - W_P} y + X_{O,1}, & \text{for } \nu_O = \nu_P \end{cases} \quad (5.16)$$

where $X_{O,1}$ is the molar fraction of species O at surface 1. The value of this constant is determined thanks to the relation between $X_{O,1}$ and $X_{O,2}$ that comes from the identity $\mathcal{Q}_1 = \mathcal{Q}_2$ which according to equations (5.7) and (5.8) gives:

$$X_{O,1}^{\nu_O} \left(\frac{p}{RT} \right)^{\nu_O - \nu_P} \frac{K_1}{K_2} = (1 - X_{O,2})^{\nu_P} \quad (5.17)$$

Furthermore, injecting Eq. (5.7) into the wall normal mass flow rate Eq. (5.12) yields the dependency relation between \dot{m} and $X_{O,1}$

$$\dot{m} = X_{O,1}^{\nu_O} \left(\frac{p}{RT} \right)^{\nu_O} K_1 (\nu_P W_P - \nu_O W_O) \quad (5.18)$$

Hence, Eq. (5.16) expressed for $y = h$ can be injected into Eq. (5.17), and with the use of Eq. (5.18) one obtains an equation in which $X_{O,1}$ is the only unknown. This manipulation allows to determine the $X_{O,1}$ constant and equations (5.15, 5.16, 5.17, 5.18) form the analytical solution for the molar fraction of species O . The molar fraction of P is then given by the relation $X_P(y) = 1 - X_O(y)$. Concerning the determination of the streamwise velocity profile, one introduces the newtonian fluid relation $\tau_{xy} = \mu du/dy$ into Eq. (5.3) which gives $\rho \nu \frac{du}{dy} - \mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \mathcal{S}$. Since μ is a constant under the approximation of constant temperature, and because $\rho(y)v(y) = \dot{m}$ is a constant according to the continuity equation (5.1), the latter differential equation is merely of second order with constant coefficients. Its integration with the boundary conditions $u(0) = u(h) = 0$ leads to the following solution:

$$u(y) = \frac{\mathcal{S}}{\dot{m}} \left[\frac{h}{e^{\frac{\dot{m}}{\mu} h} - 1} \left(1 - e^{\frac{\dot{m}}{\mu} y} \right) + y \right] \quad (5.19)$$

where \dot{m} is determined with Eq. (5.18). It is interesting to precise that if \dot{m} tends to zero, the use of second-order Taylor series in Eq. (5.19) allows to demonstrate that the streamwise velocity profile

tends to the classical Poiseuille one, namely $u(y) = \mathcal{S}/(2\mu)(yh - y^2)$. Finally, the maximum streamwise velocity is expected to be observed at the wall normal distance:

$$y|_{u_{max}} = \frac{\mu}{\dot{m}} \ln \left[\frac{\mu}{h \dot{m}} \left(e^{\frac{\dot{m}}{\mu} h} - 1 \right) \right] \quad (5.20)$$

which differs from a classical Poiseuille profile for which the maximum velocity is observed at the channel half-height. This deviation is only due to the wall normal mass flow rate and non-sensitive to the driving pressure gradient. Note also that making use of Taylor series (for $\dot{m} \rightarrow 0$) it is easy to show that $y|_{u_{max}} \rightarrow h/2$.

The analytical solution formed by equations (5.4,5.15,5.16,5.17,5.18, and 5.19) is now discussed in a few particular cases. One investigates the three cases presented in Table 5.1, for which $h = 10^{-3}m$, $p = 10^6 Pa$, $T = 2750K$, and $\mathcal{S} = 1000 Pa/m$. The transport coefficients are determined thanks to the EGLIB library [71]. Hence, the Schmidt numbers Sc_O and Sc_P satisfies Eq. (5.13), and the dynamic viscosity is set to $\mu = 8.012 \times 10^{-5} Pa \cdot s$ for cases 1 and 2, $\mu = 4.336 \times 10^{-5} Pa \cdot s$ for case 3. These three cases allow to investigate two types of oxidation schemes typically used when dealing with carbon material ablation [44]: oxidation by CO_2 species for cases 1 and 2 (corresponding to the solution $\nu_O \neq \nu_P$), and oxidation by H_2 species for case 3 (corresponding to the solution $\nu_O = \nu_P$). Cases 1 and 3 represent a solution for which the oxidation reaction is of infinite-rate type, which means that K_1 and K_2 tend to infinity. In this case the concentration of the oxidizing species is null at surface 1 and equals to unity at surface 2. On the contrary, case 2 represents a realistic case in which $K_1 = 0.5$ [MKS units] (corresponding to the order of magnitude given by the kinetics data by Chelliah *et al.* [44] for the present thermodynamic operating condition), and $K_2 = K_1/10^3$.

The results are presented in figure 5.2 for the wall normal velocity, streamwise velocity and the mass fraction of the oxidizing species. Comparing case 1 and 2, one notably observes that the streamwise velocity profile is a bit more displaced away from the centerline in case 1. This is because the activity of the surface reactions is stronger in the latter case, which leads to a higher mass rate ($\dot{m} = 2.6 \times 10^{-2} kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ for case 1, $\dot{m} = 6.8 \times 10^{-3} kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ for case 2). However, these values of \dot{m} are not strong enough to modify the streamwise velocity profiles significantly. As a result, these profiles are very close to the impermeable wall solution. On the contrary, the mass flow rate is $\dot{m} = 2.8 \times 10^{-1} kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ for case 3 and the streamwise velocity profile is clearly non symmetric. In this case, the maximum of velocity is observed at around $y/h = 0.71$ (in agreement with Eq. (5.20)) and the wall shear stress is strongly different at the two surfaces ($\tau_{w,2}/\tau_{w,1} = 5.2$ for case 3, against 1.1 and 1.02 for cases 1 and 2 respectively). Furthermore, the mass fraction profiles are no longer linear in case 3 because the difference between the species atomic weights is higher ($W_P/W_O = 0.63$ for cases 1 and 2, $W_P/W_O = 13$ for case 3). The diffusion process is then enhanced which leads to a different balance between convection and diffusion (see Eq. (5.2)). Of course, the wall normal velocity follows the same behavior since it is inversely proportional to the density variation (one recalls that the mass rate is constant) which is related to the species concentration variations.

case	O species	P species	ν_O	ν_P	Sc_O	Sc_P	K_1	K_2
1	CO_2	CO	1	2	0.92	0.59	$\rightarrow \infty$	$\rightarrow \infty$
2	CO_2	CO	1	2	0.92	0.59	0.5 [MKS units]	$K_1/10^3$
3	H_2	C_2H_2	0.5	0.5	0.14	1.82	$\rightarrow \infty$	$\rightarrow \infty$

Table 5.1 : Parameters of the test cases.

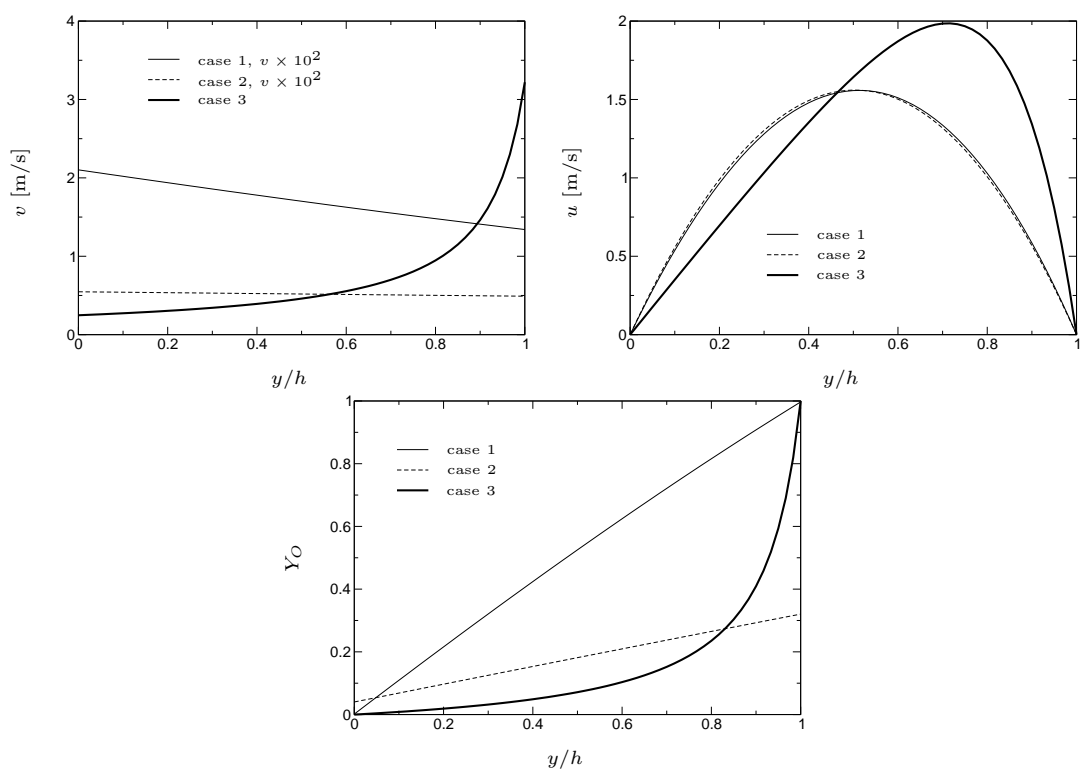


Figure 5.2 : Analytical solution plotted for three typical cases.

Confrontation de la solution analytique avec les résultats du code de calcul AVBP

La solution analytique est maintenant confrontée à la solution obtenue en utilisant le code de calcul AVBP. Le schéma numérique utilisé est le schéma Lax-Wendroff (d'ordre deux en espace et en temps). La grille de calcul est bi-dimensionnelle, périodique dans la direction de l'écoulement (\vec{x}), et comporte 3×21 points dans les directions \vec{x} et \vec{y} respectivement.

On décide de se concentrer sur un cas représentant une ablation de surface en carbone due à l'espèce CO_2 . Le schéma d'oxydation s'écrit alors $C_{(s)} + CO_2 \rightarrow 2 CO$ à la surface 1, et $2 CO \rightarrow C_{(s)} + CO_2$ à la surface 2. Les coefficients de transport sont déterminés avec la librairie EGLIB[71] ce qui conduit à une viscosité dynamique $\mu = 8.012 \times 10^{-5} Pa \cdot s$, et des nombres de Schmidt $Sc_{CO_2} = 0.918$ et $Sc_{CO} = 0.584$. Les autres paramètres de calcul sont présentés dans la table 5.2. Les résultats de la figure 5.3 montrent la bonne intégration et le bon comportement physique de la condition à la limite développée. Son utilisation est donc justifiée dans le cadre d'une simulation numérique directe d'écoulements sur paroi ablatée.

h	p	T	K_1	K_2	S
$1 \times 10^{-3} \text{ m}$	$6.6 \times 10^6 \text{ Pa}$	2750 K	12×10^{-2}	4×10^{-2}	1000 Pa/m

Table 5.2 : Paramètres utilisés pour le cas test. K_1 et K_2 sont exprimés en unités MKS.

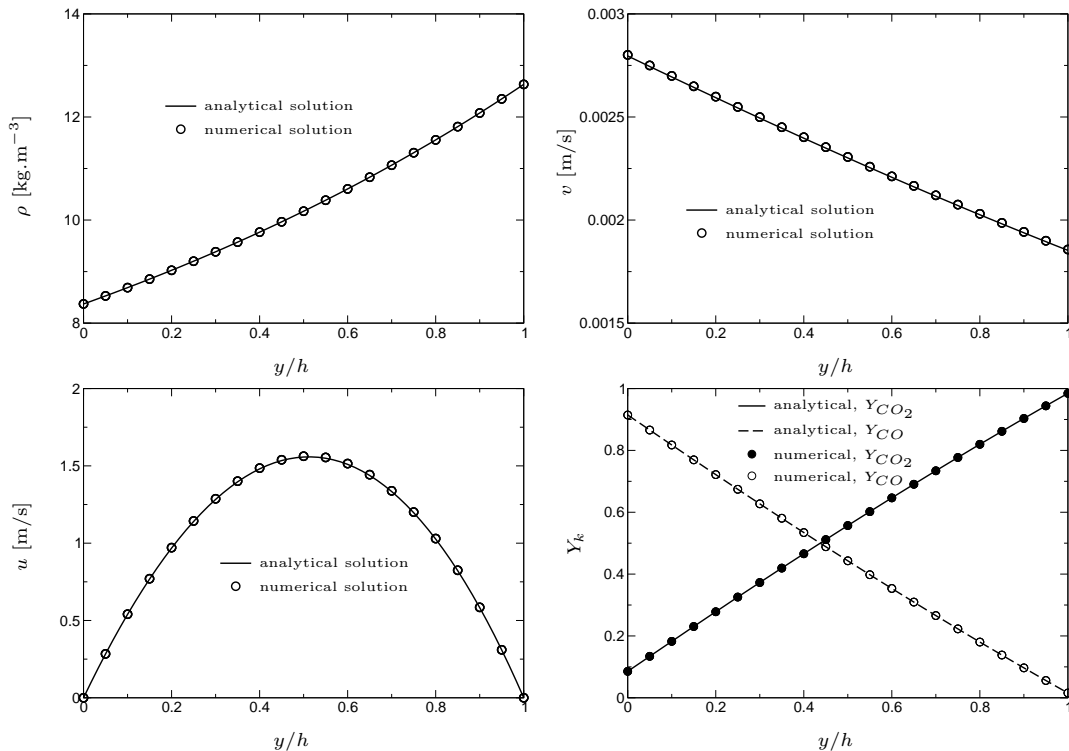


Figure 5.3 : Comparaison entre la solution analytique et celle obtenue avec le code AVBP.

CHAPITRE 6

Simulation et analyse des couches limites turbulentes sur parois ablatées

Ce chapitre présente la réalisation de simulations numériques directes de couches limites turbulentes avec ablation de la paroi. L'influence de l'ablation sur la structure de la couche limite y est présentée.

Ce travail a fait l'objet de trois conférences internationales avec comité de lecture :

- *39th AIAA Thermophysics Conference*
(25-28 juin 2007, Miami, USA)
- *Direct and Large-Eddy Simulations 7, ERCOFTAC WORKSHOP*
(8-10 septembre 2008, Trieste, Italie)
- *the 6th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP6)*
(22-24 juin 2009, Séoul, Corée du Sud)

L'ensemble de ces travaux a été repris et approfondi pour la préparation d'un article soumis dans *Journal of Turbulence*. En voici le contenu.

article submitted to **Journal of Turbulence**

Direct numerical simulation of a reacting turbulent channel flow with thermo-chemical ablation

*Olivier Cabrit*¹

CERFACS,

42 avenue Gaspard Coriolis,

31057 Toulouse, France

Franck Nicoud

Université Montpellier 2,

UMR CNRS 5149 / CC51,

Place Eugène Bataillon,

34095 Montpellier, France

abstract

This study presents the results obtained by performing a set of direct numerical simulations (DNS) of periodic channel flows over an isothermal surface subjected to thermochemical ablation. A specific boundary condition to handle the surface ablation is developed and allows to represent any kind of ablation scheme. By nature, the periodic channel flow configuration is statically unsteady when ablation is present, which requires a particular attention when investigating flow statistics. An ensemble average over several flow realizations is then employed to generate converged statistics. Hence, this procedure allows to investigate different features of the flow when focussing on species/momentum/energy/atomic conservation. The analysis reveals that the flow can be considered at chemical equilibrium under the conditions investigated. Moreover, the convective effect introduced by the Stephan velocity at ablative surface appears to have no influence on momentum conservation whereas it strongly participates to the surface cooling effect. Finally, an atomic mass conservation equation of Shvab-Zel'dovich type is formulated, and highlights passive scalar like conservation mechanism of atomic elements.

6.1 Introduction

Ablative surface flows often arise when using thermal protection materials for preserving structural components of atmospheric re-entry spacecrafts [45, 258] and Solid Rocket Motors (SRM) internal insulation or nozzle assembly [78, 73, 240]. Depending on the structure material, ablation can occur under the combination of different physical actions: 1) oxidation of the material surface by flow traveling gaseous species; 2) pyrolysis of the composite material resin (series of chemical reactions arising in the material itself); 3) sublimation of the material at high temperature; 4) mechanical erosion due to pressure or shear stress and to the impingement of solid/liquid particles on the material (for instance metal oxide particles such as $Al_2O_3(l)$). The description of surface ablation is consequently very complex to model and requires knowledges and expertise in several disciplines such as chemistry and multicomponent physics, multi-phase flow dynamics, thermo-structural mechanics of composite materials, physics of particle/droplet impingement, roughness interaction mechanisms, or physics of radiative heat transfer. For this reason, ablation process has been studied for more than forty years [129] following numerous angles of view. Despite huge scientific research efforts, a unique model able to describe the whole phenomenon does not exist. It is thus essential to properly define the assumptions and the framework of each investigation.

The present work is mainly motivated by the need to improve the understanding of momentum and heat transfer towards SRM nozzle structure. In this application, the use of high energy solid propellant generates an hostile environment and the nozzle structure is then exposed to severe thermochemical attack. Graphite and carbon-carbon composites are widely used because they offer excellent thermo-mechanical properties for low material density. By the nature of these materials, classified as non-charring materials, pyrolysis does not occurs and ablation is mainly due to the oxidizing species of the combustion products such as H_2O , CO_2 , H_2 or OH . As a consequence, the heterogeneous surface reactions make the nozzle surface to recede which is an issue during motor firing since the SRM performance is lowered by the throat area increase and the apparition of surface roughness [245]. However, this solid material sacrifice can also be seen has a desirable effect since the wall normal convection induced at the nozzle surface counters the energy flux that would have otherwise entered the nozzle structure. Hence, it is crucial to control the surface ablation during nozzle design to establish a good compromise between nozzle recession and structure cooling.

Full-scale motor firings are very expensive and do not provide sufficient information to understand the whole phenomenon. Moreover, because of technological difficulties (high temperature and pressure), the classical experimental techniques for surface ablation study [73] do not give reliable data concerning the nozzle boundary layer structure. For these reasons, numerical simulations are widely used in the field of ablation investigation. Many studies have already proposed to couple numerically the gaseous phase and the solid structure [119, 121, 36, 13, 1, 240, 20]. However, most of them are dedicated to the structural material characterization by predicting the recession rate or the surface temperature and few are oriented toward the fluid characteriza-

tion. Moreover, these studies make use of Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS) methods for which the near wall turbulence structures are intrinsically presumed. Hence, the objective of the present study is to support the understanding of turbulent boundary layer structure over ablative surfaces by the use of direct numerical simulation (DNS).

The classical periodic channel flow configuration [123] has widely demonstrated its capacity to accurately reproduce the wall turbulence structures [237, 157] and generate precise and detailed data set of generic turbulent flows under realistic operating conditions. For this reason, many authors have used this configuration to study the statistics of different types of flows such as classical incompressible flows [95], supersonic flows [99], fluids with variable properties [166] and heat transfer [111, 158], multicomponent reacting flows [35] and transpiring surface flows [235, 86]. In the present study, the compressible multicomponent reacting turbulent configuration of Cabrit and Nicoud [35] is used as a reference case for flow over inert walls. For ablative wall simulations, the no-slip wall boundary condition is merely changed to an isothermal ablative surface condition. Contrary to the approach of Velghe *et al.* [244], this work is performed under the assumption that surface roughness is not generated by ablation during the simulation. Sublimation of the structure material is not discussed in the present study since this phenomenon usually appears for temperatures over $4000K$, which corresponds to a higher regime than the one considered herein. Moreover, the question of two-phase flow effects and mechanical erosion is not addressed even if recent studies have shown the influence of these phenomena [30, 254]. This assumption is supported by the experimental study of Klager [124] which has demonstrated that chemical attack is the primary source of erosion. To summarize, the present study only focusses on ablation by chemical oxidation of the surface. It is shown how this surface characteristic influences the momentum/energy/atomic conservation by analyzing the corresponding balances for three operating conditions of the ablation boundary condition. The influence of both the oxidation scheme and the wall normal Stephan velocity is investigated.

The paper is arranged as follows. Section 6.2 presents the theoretical and numerical background. Particular attention is given to the ablation boundary condition description which has been developed for this study. Section 6.3 explains and justifies the ensemble average statistical procedure retained for this study. Section 6.4 provides the analysis of the boundary layer structure. Finally, the conclusions of this work are drawn in section 6.5.

6.2 Description of the simulations

6.2.1 Flow equations

6.2.1.a) Conservation laws

Several books [253, 131, 183] present the conservation laws that model the physics of multi-component reacting compressible flows. In the present study one makes use of the same formalism and notation as in reference [35]. Continuity equation (6.1), mass species conservation (6.2), momentum conservation (6.3), total non-chemical energy conservation (6.4) and perfect gas equation of state (6.5) then reads (with Einstein notation for implicit summation):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (6.1)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \mathcal{S}_i \quad (6.3)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij} u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} (p u_i) + \dot{\omega}_T + \mathcal{Q} + u_i \mathcal{S}_i \quad (6.4)$$

$$\frac{p}{\rho} = r T \quad (6.5)$$

with τ_{ij} the viscous shear stress tensor and q_i the molecular heat flux (different from q_i^* that represents the sensible enthalpy flux) respectively given by:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6.6)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_k h_{s,k} Y_k V_{k,i} + \rho \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k V_{k,i}}_{q_i^*} \quad (6.7)$$

The following notation stands for the present study: i subscripted quantities refer to variables dependent on directions \vec{x} , \vec{y} and \vec{z} (for multiple summation, subscript i is replaced by either j or l); subscript k refers to k^{th} species; u_i is the velocity vector whose components are noted u , v and

w in the cartesian coordinate system; p is the thermodynamic pressure; T the temperature; ρ the density of the fluid; Y_k and X_k denotes the mass and molar fractions of species k respectively, with $Y_k = X_k W_k / W$; W_k the atomic weight of species k ; $W = \sum_k X_k W_k$ the mean molecular weight of the mixture; $r = R/W$ the perfect gas constant per mass unit with R the perfect gas constant per mole; $V_{k,i}$ the diffusion velocity of species k in i -direction; $\dot{\omega}_k$ the mass reaction rate of species k ; $\dot{\omega}_T = -\sum_k \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k$ is the heat release with $\Delta h_{f,k}^0$ the chemical enthalpy of formation per unit mass of species k ; \mathcal{S}_i the momentum source term acting in the i -direction and \mathcal{Q} the energy volume source term; $C_{p,k}$ the heat capacity at constant pressure of species k ; $C_p = \sum_k C_{p,k} Y_k$ and C_v the heat capacities at constant pressure and constant volume of the mixture, respectively; μ and $\nu = \mu/\rho$ are the dynamic and the kinematic viscosities, respectively; λ the heat diffusion coefficient of the fluid; E is the total non-chemical energy; $h_{s,k} = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT$ represents the sensible enthalpy of one species k with a reference temperature $T_0 = 0K$ in this work; $h_k = h_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0$ is the specific enthalpy (sum of sensible and chemical parts) of one species k ; the enthalpy of the mixture is represented by the specific enthalpy $h = h_s + \sum_k \Delta h_{f,k}^0 Y_k$ with $h_s = \sum_k h_{s,k} Y_k$ the sensible enthalpy of the mixture.

This system of equations (6.1-6.7) is valid under the following assumptions:

- buoyancy body force is negligible,
- effects of volume viscosity are null,
- no Dufour effect for the heat flux,
- the gas mixture is supposed to be perfect,
- heat transfer by radiation is negligible.

The validity of these assumptions has been discussed and justified in a previous study [35] that simulated the same gaseous flow under the same thermodynamic conditions over inert walls. Moreover, concerning the validity of neglecting the radiative heat transfer, Amaya *et al.* [7] demonstrated that the radiative source term has no influence upon the turbulence characteristics of the flow.

6.2.1.b) Multicomponent transport modeling

When diffusion due to external forces, pressure and temperature gradients are neglected, the expression of the diffusion velocity is reduced to:

$$V_{k,i} = - \sum_l D_{kl} \frac{\partial X_l}{\partial x_i} \quad (6.8)$$

where D_{kl} are the multicomponent diffusion coefficients of the diffusion matrix. Note that the Soret effect (diffusion due to temperature gradients) is well negligible according to the *a priori* tests performed in reference [35]. Solving this transport system Eq. (6.8) could be very expensive when the number of considered species is high. For this reason, the transport system is often

simplified making use of the Hirschfelder and Curtiss approximation [92] with correction velocity. As mentioned by Giovangigli [80] this is the best first-order accurate model for estimating diffusion velocities of a multicomponent mixture. The diffusion velocity system is then replaced by:

$$V_{k,i}^{\text{hc}} X_k = -\mathcal{D}_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (6.9)$$

where $V_{k,i}^{\text{hc}}$ denotes the Hirschfelder and Curtiss diffusion velocity, and \mathcal{D}_k an equivalent diffusion coefficient of species k into the rest of the mixture. The latter coefficient is built from the binary diffusion coefficients $\mathcal{D}_{ij}^{\text{bin}}$ which can be assessed from the gas kinetic theory [80]:

$$\mathcal{D}_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / \mathcal{D}_{jk}^{\text{bin}}} \quad (6.10)$$

Moreover, to insure that the system of equations satisfies the constraint $\sum_k Y_k V_{k,i} = 0$, a correction velocity V_i^{cor} is added to the Hirschfelder and Curtiss diffusion velocity $V_{k,i}^{\text{hc}}$. At each time step, the correction velocity is computed as:

$$V_i^{\text{cor}} = \sum_k \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (6.11)$$

so that the diffusion velocity for each species k reads:

$$V_{k,i} = V_{k,i}^{\text{hc}} + V_i^{\text{cor}} \quad (6.12)$$

Combined with the assumption of constant Schmidt numbers, the Hirschfelder and Curtiss approximation is very convenient because the equivalent diffusion coefficients can be easily related to the kinematic viscosity according to: $\mathcal{D}_k = \nu / Sc_k$. The problem is then efficiently closed by imposing the Schmidt numbers and it is not necessary to compute the $\mathcal{D}_{ij}^{\text{bin}}$ coefficients which are complex functions of collision integrals and thermodynamics variables.

The mixture retained in this study has been built by simplifying a realistic sample of gas ejected from a SRM nozzle. About a hundred gaseous species usually compose this kind of mixture. However, only the ones whose mole fraction is greater than 0.001 have been kept to generate a simpler mixture, nitrogen being used as diluent. Hence, the following seven species are retained for the simulation: H_2 , H , H_2O , OH , CO_2 , CO and N_2 . No aluminized particles are thus considered even if their importance on graphite nozzle erosion is a current active topic in the literature. Indeed, the experiments of Klager [124], Geisler [78] and Cvelbar [57] with aluminized composite solid propellant, as well as the numerical analysis of Keswani *et al.* [120] have indicated that the recession rate decreases when aluminum concentration increases. However, these studies also reveal that this phenomenon was strongly correlated with the associated decreased concentration of oxidizing species H_2O and CO_2 . This means that aluminized species rather have an indirect impact on surface ablation which justifies not to consider them in the present study. The oxidizing

Pr	Sc_{H_2}	Sc_H	Sc_{H_2O}	Sc_{OH}	Sc_{CO_2}	Sc_{CO}	Sc_{N_2}
0.47	0.2	0.15	0.65	0.54	0.98	0.86	0.87

Table 6.1 : Transport coefficients of the simulated mixture.

species involved in the equivalent mixture are thus sufficient to generate a good representation of carbon-carbon surface ablation.

The Schmidt and Prandtl numbers are determined using the EGLIB library [70, 71] and summarized in Table 6.1. They are assumed to be constant in the simulation which is a well accepted assumption [183]. The same multicomponent library has been used to compute the temperature dependency of the mixture dynamic viscosity. A power-law expression is finally retained:

$$\mu = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^c \quad (6.13)$$

where $\mu_{\text{ref}} = 8.194 \times 10^{-5}$ Pa.s, $T_{\text{ref}} = 3000$ K and $c = 0.656$.

6.2.1.c) Chemical kinetics of the mixture

The simulated mixture needs a reliable kinetic scheme which reproduces the concentration changes of each species during the simulations. Hence, a kinetic scheme based on seven chemical reactions has been tuned using the GRI-Mech elementary equations (URL: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech). Details of the retained scheme are presented in Table 6.2 where the rate of reaction, K , is modeled by a classical Arrhenius formulation [80]: $K = AT^\beta \exp(-E_a/RT)$, where A stands for the pre-exponential factor, β for the temperature exponent and E_a for the activation energy. This kinetic scheme has been validated verifying its ability to predict the proper chemical equilibrium composition as given by the EQUIL library of CHEMKIN [116, 117] and the whole set of species involved in GRI-Mech chemical reaction mechanism. The same kinetic scheme was also used in [35].

6.2.2 Boundary condition for surface ablation

The development of the boundary condition for surface ablation is performed under the following assumptions: no mechanical erosion, no geometry deformation. Note also that by the nature of C/C composite materials, it is not necessary to take into account any pyrolysis modeling. Hence, one supposes that the near wall flow description will be sufficiently and accurately predicted by considering the effect of heterogeneous oxidation reactions only.

Reaction	A [cgs units]	β	E_a [cal/mole]	$\alpha_{k,r}$
$2H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.00E+18	-1.0	0.	$\alpha_{H_2} = \alpha_{H_2O} = 0.0$
$2H + H_2 \rightleftharpoons 2H_2$	9.00E+16	-0.6	0.	-
$2H + H_2O \rightleftharpoons H_2 + H_2O$	6.00E+19	-1.25	0.	-
$2H + CO_2 \rightleftharpoons H_2 + CO_2$	5.50E+20	-2.0	0.	-
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.20E+22	-2.0	0.	$\alpha_{H_2} = 0.73; \alpha_{H_2O} = 3.65$
$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.16E+08	1.51	3430.	-
$OH + CO \rightleftharpoons H + CO_2$	4.76E+07	1.228	70.	-

Table 6.2 : Chemical kinetic scheme retained for this study. The first and fifth reactions involve an abstract third body, denoted by M . For these reactions the third-body efficiencies are set by default to $\alpha_{k,r} = 1.0$ for all the species, except for the ones given in the table.

The ablation process is simplified following the assumption used by Baiocco and Bellomi [13], namely the injection velocity (also called Stephan velocity) is assumed to be orthogonal to the receding surface (tangential components are set to zero). Hence, this new boundary condition prescribes the boundary values for the conservation equations (of mass, momentum, species and energy) to mimic the behavior of an ablated isothermal wall. The three following quantities are thus imposed: v_{inj} the wall normal Stephan velocity, $\partial Y_{k,w}/\partial n$ the wall normal mass fraction flux of each species involved in the heterogeneous reactions, and T_w the temperature at the wall.

The boundary condition is inspired by the wall recession model proposed by Keswani and Kuo [121, 120] and the work of Kendall *et al.* [119]. The analytical development that follows is done in the relative referential of the surface and not in the global coordinate system. This means that all the equations presented herein are projected on the wall normal directed toward the gaseous domain by convention. Starting from the conservation equation of the mass flux, \dot{m} , at the fluid/structure interface, one can write:

$$\dot{m} = \rho_c \dot{r}_c = \rho_w v_{inj} \quad (6.14)$$

where ρ_c denotes the mass density of the composite material, \dot{r}_c the recession rate of the solid surface, and ρ_w the gas density at the wall. Equation (6.14) indicates that the recession solid velocity is linked to the Stephan velocity through the ratio of solid and gas densities: $v_{inj}/\dot{r}_c = \rho_c/\rho_w$. Considering the carbon density to be about $\rho_c \approx 1900 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and the gas density to be of order $\rho_w \approx 7 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, one finds that the solid surface moves several hundreds times slower than the heterogeneous reaction gas entering inside the gaseous domain. This justifies not to take into account the structure deformation when investigating the gaseous phase behavior. Focussing on the species conservation balance at the fluid/structure interface one can write the same kind of

balance:

$$\rho_w v_{inj} Y_{k,w} + \rho_w V_{k,n,w} Y_{k,w} = \dot{s}_k \quad (6.15)$$

where $Y_{k,w}$ stands for the mass fraction of species k at the wall, $V_{k,n,w}$ the wall normal diffusion velocity of species k at the wall, and \dot{s}_k the surface mass production rate of species k that depends on the chemical heterogeneous reactions involved in the oxidation process (the modeling of \dot{s}_k is presented further in this section). Summing over all the species, and according to the mass conservation constraint $\sum_k Y_k V_{k,i} = 0$, an expression for the wall normal Stephan velocity is obtained:

$$v_{inj} = \frac{1}{\rho_w} \sum_k \dot{s}_k \quad (6.16)$$

The Hirschfelder and Curtiss approximation with correction velocity, equations (6.9,6.11,6.12), are then used to evaluate the normal diffusion flux of each species at the ablated wall:

$$Y_{k,w} V_{k,n,w} = -\mathcal{D}_k \frac{W_k}{W_w} \frac{\partial X_{k,w}}{\partial n} + Y_{k,w} V_n^{\text{cor}} \quad (6.17)$$

with,

$$V_n^{\text{cor}} = \sum_k \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W_w} \frac{\partial X_{k,w}}{\partial n} \quad (6.18)$$

where W_w is the mean molecular weight of the mixture at the wall. Moreover, one knows that the relation between the mole fraction gradients and their mass fraction counterparts reads:

$$\frac{\partial X_k}{\partial x_i} = \frac{W}{W_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \frac{W^2}{W_k} Y_k \sum_l \frac{1}{W_l} \frac{\partial Y_l}{\partial x_i} \quad (6.19)$$

Making use of Eq. (6.19) and injecting equations (6.16), (6.17), and (6.18) into Eq. (6.15), one can relate $Y_{k,w}$ to its normal gradient at the boundary surface:

$$\frac{\partial Y_{k,w}}{\partial n} = \frac{Y_{k,w}}{\mathcal{D}_k} \left(\frac{\sum_l \dot{s}_l}{\rho_w} + V_n^{\text{cor}} + W_w \mathcal{D}_k \sum_l \frac{1}{W_l} \frac{\partial Y_{l,w}}{\partial n} \right) - \frac{\dot{s}_k}{\rho_w \mathcal{D}_k} \quad (6.20)$$

where the term V_n^{cor} has not been fully expressed as a function of $Y_{k,w}$ for clarity. Thereby, Eq. (6.20) constitutes a system of equations of size $ns \times ns$, ns being the number of species present in the mixture. In the present study, this system is solved thanks to an iterative method which gives for each time step the wall normal value of the mass fraction gradient that must satisfy the numerical solver. The tangential components of the species gradients are predicted by the numerical scheme and left unchanged. Finally, the surface temperature is imposed with a Dirichlet method.

The framework described above makes no restriction concerning the number and the nature of the chemical species or the kind of heterogeneous chemical reactions. This means that sublimation mechanisms can be implemented as well as oxidation reactions. The boundary condition for ablated walls, Eq. (6.20), can be summarized through the following characteristics:

- arbitrary mixture compositions and heterogeneous reactions can be considered;
- the momentum condition for v_{inj} is imposed with a Dirichlet method according to Eq. (6.16), tangential components being set to zero;
- the variations of species concentrations is accounted for with the Neumann condition of Eq. (6.20), tangential components being computed by the numerical scheme and left unchanged;
- the surface temperature, T_w , is imposed by a Dirichlet condition.

The final closure of the boundary condition is insured by the model retained for the surface production rates, \dot{s}_k , which depends on the heterogeneous reaction considered. One first recalls that sublimation is not considered in the present study because the temperature of investigation is too low (temperature higher than 4000K is required [201]). Experimental studies [83, 124] have however shown that chemical attack arises by species such as H_2O , CO_2 , OH , H_2 , O_2 and O for the pressure and temperature considered herein (see section 6.2.3). The oxidation by species O_2 and O is often negligible because of the weak concentration of these species. Besides, note that they do not appear in the equivalent mixture formulated above. Moreover, as reported by Thakre and Yang [240], there is a disagreement between many investigators concerning the importance of the oxidation reaction by H_2 which justifies not to consider this reaction. Finally, we also neglect the oxidation of solid carbon by OH species because Chelliah *et al.* [44] reported two orders of magnitude between the pre-exponential factor of this oxidation reaction and the ones of the oxidation reactions by H_2O and CO_2 .

For these reasons, one only considers the two predominant oxidation reactions of C/C composite in SRM nozzle flow, namely:



These two reactions have been extensively studied [139, 81, 22, 44], and one usually makes use of a classical Arrhenius law for modeling their rate of reaction. The resulting model for the progress of the first reaction (oxidation by H_2O) can be written as:

$$Q_1 = \rho_w \frac{Y_{H_2O,w}}{W_{H_2O}} A_1 T_w^{\beta_1} \exp\left(\frac{-E_{a,1}}{RT_w}\right) \quad (6.23)$$

and for the second reaction (oxidation by CO_2):

$$Q_2 = \rho_w \frac{Y_{CO_2,w}}{W_{CO_2}} A_2 T_w^{\beta_2} \exp\left(\frac{-E_{a,2}}{RT_w}\right) \quad (6.24)$$

However, the empirical determination of the Arrhenius coefficients does not always provide sufficiently reliable results. For instance, the pre-exponential factor suggested by Golovina [81] is about an order of magnitude less than the one of Libby and Blake [139]. One thus decides not

to impose the values of the Arrhenius coefficients as it is usually done [240], but rather to make use of the fact that the surface temperature is assumed constant during the whole simulation. This means that the Arrhenius parts of equations (6.23) and (6.24) is no longer dependent on the surface temperature. The rates of reaction can thus be seen as constants for the simulation and equations (6.23) and (6.24) are reduced to:

$$\mathcal{Q}_1 = \rho_w \frac{Y_{H_2O,w}}{W_{H_2O}} K_1 \quad (6.25)$$

$$\mathcal{Q}_2 = \rho_w \frac{Y_{CO_2,w}}{W_{CO_2}} K_2 \quad (6.26)$$

where K_1 and K_2 are the two constants that close the problem and that must be specified. The surface production rate of species k due to r reactions is expressed as:

$$\dot{s}_k = W_k \sum_r \nu_{k,r} \mathcal{Q}_r \quad (6.27)$$

where $\nu_{k,r}$ is the difference between the backward and forward molar stoichiometric coefficients of reaction r . Keswani and Kuo [122] have shown that H_2O is the dominant oxidizing species and that oxidation by CO_2 is the second important reaction. In order to investigate this aspect, one uses two types of oxidation scheme in this paper. The first scheme solely models the oxidation by H_2O . In this case, knowing the initial values of the Stephan velocity at the beginning of the computation, v_{inj}^i , and the initial mass fraction of water at the wall, $Y_{H_2O,w}^i$, the expression for K_1 can be retrieved replacing \dot{s}_k of Eq. (6.16) by Eq. (6.27):

$$K_1^{1 \text{ reac}} = \frac{v_{inj}^i W_{H_2O}}{W_C Y_{H_2O,w}^i} \quad (6.28)$$

where $K_1^{1 \text{ reac}}$ is the constant value imposed all along the simulation when only the first oxidation reaction Eq. (6.21) is considered.

The second oxidation scheme employed in this study involves the oxidation reactions by H_2O and CO_2 simultaneously. As advanced by Libby and Blake [139], the specific rate of both reactions can be considered to be equal which means that $K_1 = K_2$. Knowing the initial oxidizing species concentrations at the wall and the initial Stephan velocity, and rearranging Eq. (6.27) into Eq. (6.16) one shows that both rates of reaction must satisfy the relation:

$$K_1^{2 \text{ reac}} = K_2^{2 \text{ reac}} = \frac{v_{inj}^i}{W_C \left(\frac{Y_{H_2O,w}^i}{W_{H_2O}} + \frac{Y_{CO_2,w}^i}{W_{CO_2}} \right)} \quad (6.29)$$

where $K_1^{2 \text{ reac}}$ and $K_2^{2 \text{ reac}}$ are imposed as constants all along the simulation when the two oxidation reactions, Eq. (6.21) and Eq. (6.22), are considered.

This method presents the advantage of being free of the experimental determination of the Arrhenius coefficients. Moreover, the use of equations (6.28) and (6.29) allows to control the initial value of the Stephan velocity. This is convenient since v_{inj}^i can then be set in agreement with available data in actual SRM.

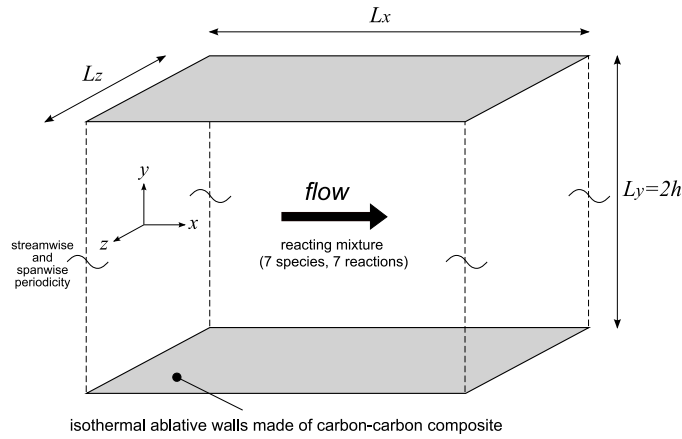


Figure 6.1 : Description of the computational domain.

6.2.3 Operating conditions and computational domain

The aim of this work is to study the influence of surface ablation upon the flow structure under the configuration of periodic channel flow [123]. Figure 6.1 shows the reference coordinate system and the notation used to describe the computational domain. Periodic boundary conditions are applied in the homogeneous streamwise (\vec{x}) and spanwise (\vec{z}) directions. Table 6.3 presents the four cases investigated. The first one, noted *I*, is the reference case for this study because it corresponds to an inert wall simulation (case *B* of Cabrit and Nicoud [35]). The three others cases correspond to ablative wall simulations. The comparison between cases *A1* and *A2* will give information concerning the influence of the oxidation scheme, while the comparison between cases *A2* and *A3* will inform about the influence of the injection velocity. The reference injection velocity for this work is set to $v_{inj}^{ref} = 0.0428 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ which is a typical value for SRM nozzle application. However, when the results are similar for all the ablative wall simulations, case *A2* will be preferably shown because this case contains more physics than the others because of its two-reaction oxidation scheme. Note in table 6.3 that the time is not an homogeneous dimension for the ablative wall simulations because the periodic conditions does not allow to balance the mass flux entering the domain when the walls are ablated. As a consequence, the mean mass of the domain continuously increases and the flow statistics are susceptible to be time dependent. This means that the statistical treatment must be performed with care as discussed in the forthcoming section 6.3. At this step, one specifies that for any variable f , the quantity \bar{f} represents its value averaged in the homogeneous directions. This notation will be explicated in detail in section 6.3.

The pressure gradient that drives the flow and compensates for viscous dissipation is enforced by adding a space and time constant source term in the streamwise direction. Hence, the momentum source term \mathcal{S}_i of Eq. (6.3) and Eq. (6.4) is null in the wall normal and spanwise directions but takes a constant value, noted \mathcal{S}_x , in the streamwise direction.

cases	surface oxidation scheme	initial Stephan velocity, v_{inj}^i	homogeneous directions
I	none (inert wall)	none	x, z, t
A1	1 reaction, Eq. (6.28)	v_{inj}^{ref}	x, z
A2	2 reactions, Eq. (6.29)	v_{inj}^{ref}	x, z
A3	1 reaction, Eq. (6.28)	$4 v_{inj}^{ref}$	x, z

Table 6.3 : Description of the cases of investigation.

In addition, a source term, noted \mathcal{Q} , that warms the fluid in volume is added to the energy equation (6.4) in order to drive the mean temperature of the wall-bounded flow to the desired value T_{mean} . At each time step, a space constant value of \mathcal{Q} is adjusted dynamically according to:

$$\mathcal{Q}^{t+1} = \rho_{av} C_{v,av} \frac{T_{\text{mean}} - \frac{1}{V} \iiint_{\Omega} T^t dV}{\tau_{\text{relax}}} \quad (6.30)$$

where subscript “ av ” denotes an averaged quantity integrated over space and time variables, \mathcal{Q}^{t+1} the energy source term at time $t + \Delta t$, Ω the computational domain and V its volume, T^t the temperature at time t , and τ_{relax} a relaxation time coefficient set in the present study to $\tau_{\text{relax}} = 0.3h/\overline{u}_\tau$ with $\overline{u}_\tau = \sqrt{\overline{\tau}_w/\overline{\rho}_w}$ the mean friction velocity averaged in the homogeneous directions.

For all the cases reported in table 6.3, the target friction number is about $Re_\tau = h\overline{u}_\tau/\nu_w = 300$, which corresponds to a bulk Reynolds number (based on the channel half-height and bulk quantities) of $Re_b \approx 4200$. For all cases, the mean target temperature of the flow is set to $T_{\text{mean}} = 3000K$ and the wall surface temperature is set to $T_w = 2750K$. The mean pressure is around $p = 10MPa$. The spatial resolution of the turbulent structures is performed on $31 \times 159 \times 39$ grid points, with $L_x/h = 3.14$ and $L_z/h = 1.25$. In terms of grid spacing this corresponds to $\Delta x^+ = 29$ and $\Delta z^+ = 9$, where “ $+$ ” notation refer to a scaling by the viscous length $y_\tau = \nu_w/\overline{u}_\tau$. The mesh is refined in the vicinity of the wall in order to well capture the turbulence created in this region. The minimum and maximum grid spacing in the wall normal direction are about $\Delta y_w^+ = 0.8$ at the wall and $\Delta y_c^+ = 6$ at the center of the channel. The length of the computational box and the number of grid points seem to be very small compared to the reference simulation of Hoyas and Jiménez [95]. However, the study of Cabrit and Nicoud [35] has demonstrated that this computational domain is sufficient to capture the first order statistics of this reacting compressible flow. Indeed, the domain has been built to be at least twice wider than the minimal unit flow conditions defined by Jiménez and Moin [105].

The numerical fidelity of the calculations has been checked looking at the wall normal evolution of the Kolmogorov length scale compared to the grid spacing. This diagnostic is presented in figure 6.2 for case A2, where the Kolmogorov length scale is estimated as: $\eta = (\overline{\nu}^3/\overline{\epsilon})^{1/4}$, with $\overline{\epsilon}$

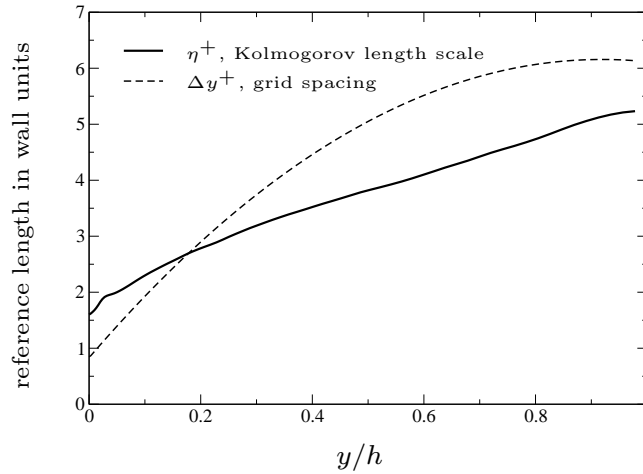


Figure 6.2 : Wall normal grid spacing of the computational domain compared to the Kolmogorov length scale.

the mean dissipation rate of the turbulent kinetic energy. This figure shows that the spatial resolution is very good near the wall and of the order of the Kolmogorov length scale near the center of the channel which argues in favor of an accurate flow resolution. Furthermore, the streamwise and spanwise two-point correlations from the channel centerline and near the walls are presented in figure 6.3 for case *A2*. The correlation coefficients quickly fall to zero indicating a sufficient spatial decorrelation to allow the use of periodic boundary conditions. Note that the statements presented in figures 6.2 and 6.3 for case *A2* are similar for all the present simulations.

6.2.4 Numerical method

DNS are performed with the AVBP solver developed at CERFACS. This parallel code offers the capability to handle unstructured or structured grids in order to solve the full 3D compressible reacting Navier-Stokes equations with a cell-vertex formulation. During the past years, its efficiency and accuracy have been widely demonstrated in both LES and DNS for different flow configurations [162, 204, 151, 35].

A set of Taylor-Galerkin schemes are available in the AVBP code to solve the flow equations described above. Notably a third order accurate formulation in both time and space is available [52] as well as a second order accurate cell-vertex implementation of the Lax-Wendroff scheme. The latter has been used in the present study to save CPU time and because the grid resolution used is fine enough to justify a second order approximation.

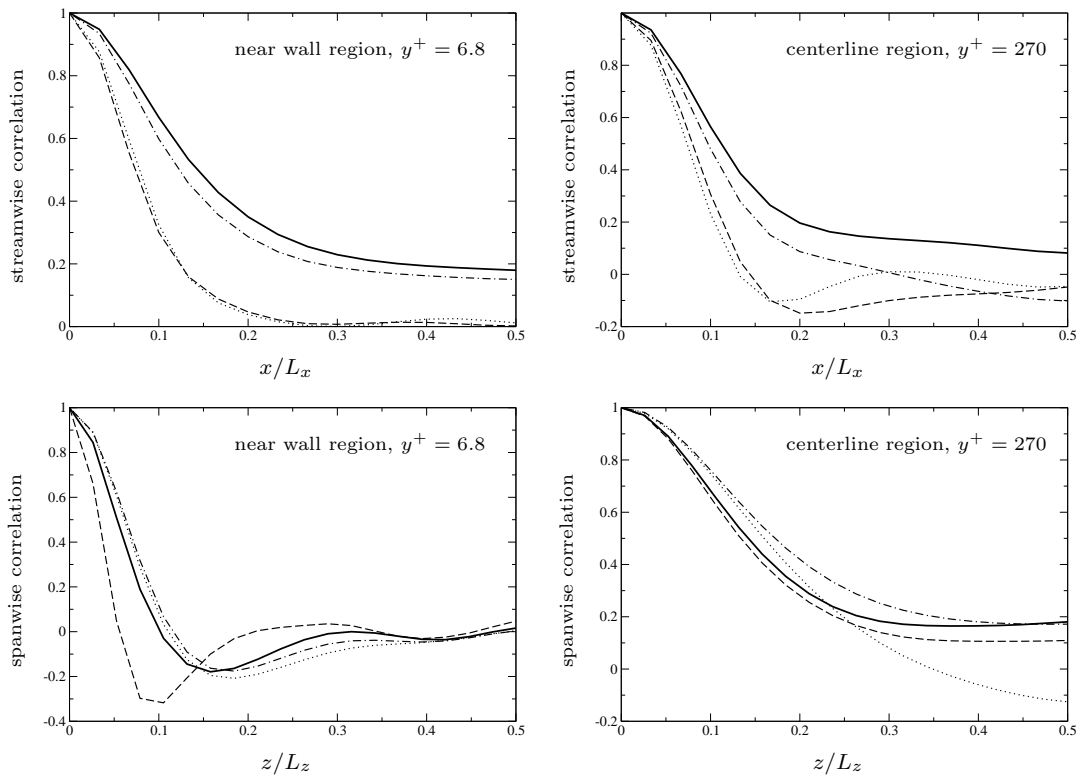


Figure 6.3 : Two-point correlations in streamwise and spanwise directions for case A2. — : u ;
 - - - : v ; : w ; - · - : T .

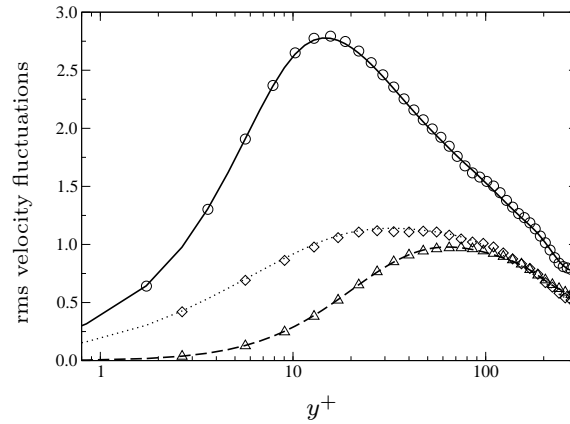


Figure 6.4 : Root-mean-square velocity fluctuations scaled by $\overline{u_\tau}$. Comparison between the statistics obtained with the whole case *I* dataset (lines) and with the twenty decorrelated solution files used to initialize the ablated wall simulations (symbols). (—, \circ): u'_{rms} ; (---, \triangle): v'_{rms} ; (....., \diamond): w'_{rms} .

6.3 Statistical Procedure

The statistics for the DNS with inert walls (case *I*) are collected with the classical procedure: averaging over \vec{x} and \vec{z} directions, and over an assimilation time $\tau_s \approx 20\tau_d$, with $\tau_d = h/\overline{u_\tau}$. On the contrary, the DNS's with ablative walls (cases *A1*, *A2* and *A3*) are statistically unsteady because the oxidation reaction at the wall consumes the H_2O species initially present in the computational domain (as well as CO_2 species when the second oxidation reaction is activated). Thus, the data cannot be averaged over time which, given the moderate size of the computational domain, makes the statistical convergence more challenging. For instance, the computational box size should be about a hundred times wider to obtain converged statistics at a given time. Moreover, the time advancement of the DNS is dependent on the initial condition that determines the spatial organization of the oxidizing species. For these reasons, we have performed an ensemble average from twenty different DNS's with ablative walls, differing because of the initial conditions. To insure sufficient decorrelation between the initial solutions, they are chosen from the inert wall simulation with a separating time equal to the diffusion time, τ_d . The validity of the initial solution sample has been tested verifying that the statistics obtained with these twenty instantaneous solutions give accurate reproduction of the statistics accumulated with the full inert wall DNS (case *I*, with more than 500 instantaneous solutions). This result is presented in figure 6.4 for the root-mean-square (rms) velocity fluctuations.

The ensemble average procedure for the ablative wall simulations is illustrated in figure 6.5 where the time evolution of the injection velocity and the density at the wall is presented for one probe located on the ablated surface of case *A2*. One observes the convergence of the average per-

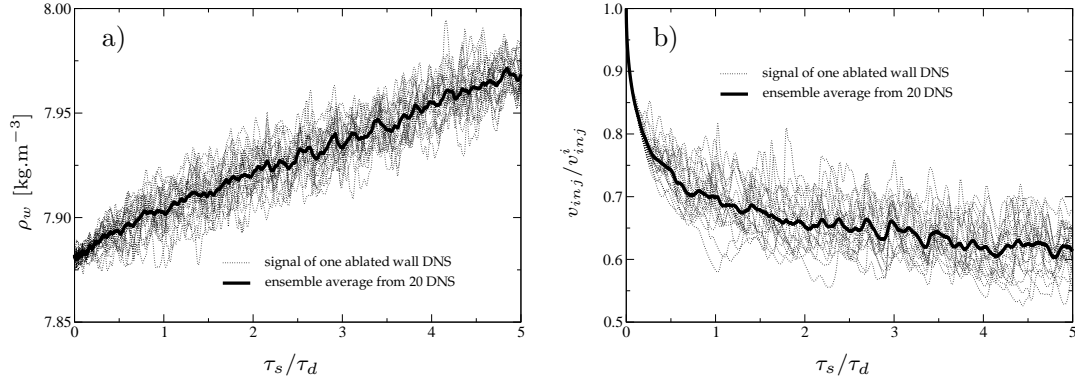


Figure 6.5 : Evolution of the density (a) and of the injection velocity (b) for one probe located at the wall during the ablative wall simulation of case A2. The velocity is scaled by the initial injection velocity, v_{inj}^i , and the simulated time, τ_s , is scaled by τ_d .

formed over twenty realizations compared to the single signal of each realization. Moreover, in order to increase the statistical sample at a given observation time, one also collects two instantaneous solution fields before and after the observation time both separated by approximately one Kolmogorov time scale. This means that at a given observation time, one actually makes use of sixty solutions fields to performed the ensemble average. This procedure is illustrated in figure 6.6 and justified in figure 6.7 where the separation time between the solutions used to fill the statistical sample is compared to the Kolmogorov time scale, $\tau_\eta = (\bar{\nu}/\bar{\epsilon})^{1/2}$, inside the boundary layer. These additional fields allow to filter the high frequencies of the statistics without perturbing their general trend. In other words, one obtains more converged statistics without distorting them.

Let us properly describe the notations used in the forthcoming sections. For the inert wall case I, \bar{f} represents the average of variable f in \vec{x} and \vec{z} directions and over time. For the ablative wall cases (A1, A2, and A3), the quantity \bar{f} represents the average of variable f in \vec{x} and \vec{z} directions and over the ensemble of the realization fields forming the statistical sample at a given time of observation. For all the cases, \tilde{f} represents the Favre average defined as $\tilde{f} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$. The double prime, $''$, represents the turbulent fluctuations with respect to Favre averages.

The main difference between the simulated and the real ablative wall cases is that the oxidizing species are continuously consumed in the simulated case (which means that no ablation would be observed for an infinite simulated time) whereas in the real case the combustion products passing through the nozzle continuously carry oxidizing species that feed the oxidation mechanism. Hence, the periodic channel configuration, combined with the statistical procedure described above, allows to obtain converged statistics representing the unsteady evolution of the turbulent boundary layer over surface ablation for a given amount of initial oxidizing species.

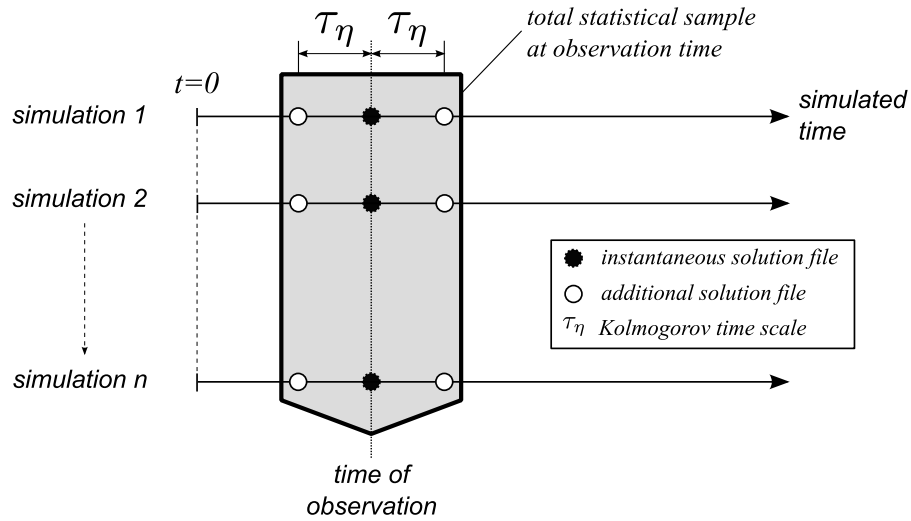


Figure 6.6 : Schematic description of the procedure for evaluating the flow statistics at a given time of observation for the ablative surface simulations.

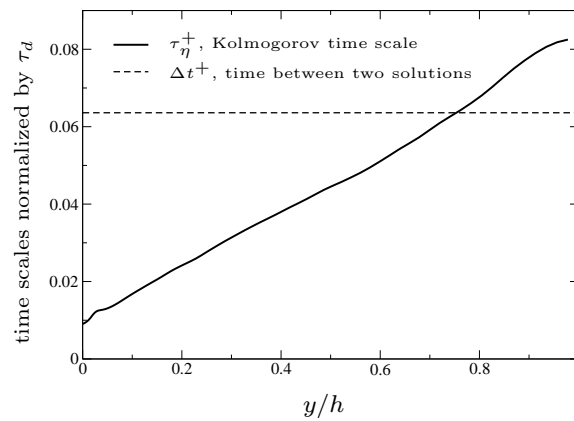


Figure 6.7 : Comparison between the wall normal variation of the Kolmogorov time scale and the time that separates two solution files used to fill the statistical sample.

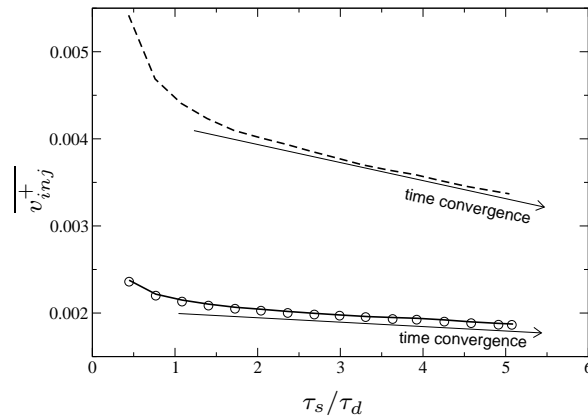


Figure 6.8 : Time convergence of the Stephan velocity expressed in wall units (scaling by $\overline{u_\tau}$). \circ : case A1; — : case A2; - - - : case A3; \rightarrow : linear time convergence.

Thereby, in order to analyze the generic behavior of a turbulent boundary layer over ablated surface one must find the appropriate scalings of the different observed variables to render them time independent.

One notably observes in figure 6.8 that the statistics do not give relevant results before $\tau_s = \tau_d$ which is the necessary time for the Stephan velocity (expressed in wall units) to adapt from the initial condition. For $\tau_s > \tau_d$, figure 6.8 indicates that a linear time evolution properly represents the similar behavior of the Stephan velocity. This result has also been observed for others variables such as the atomic and species concentrations. Indeed, figures 6.9 and 6.10 show the time evolution of atomic molar fraction profiles of the carbon atom (whose variation is related to the amount of carbon injected inside the boundary layer by surface ablation) and of the oxygen atom (a relevant quantity for oxidation mechanism). These figures illustrate that a proper scaling is found by scaling the concentration profiles by their centerline value. This result also stands for mass fraction profiles for which the example of water species is given in figure 6.11. In figures 6.9, 6.10 and 6.11 the result of the steady inert simulation is also presented to illustrate the strong changes induced by surface ablation. Note that case A1 and A3 are not presented, as well as others atomic and species concentration profiles, because all these data lead to the same conclusion concerning the statistical procedure: for $\tau_s > \tau_d$, the oxidation mechanism is mainly led by the diffusion of oxidizing species toward the wall and scaling the concentration profiles by their centerline value facilitate the research of time auto-similar profiles.

Hence τ_d seems to be the correct characteristic time determining the necessary time for the flow to adapt from the initial condition. However, one finds that the characteristic convergence time can differ when looking at other variables and analyzing the statistics, one finds that the wall heat flux is the limiting variable concerning time convergence. Indeed, although figure 6.12 illustrates that

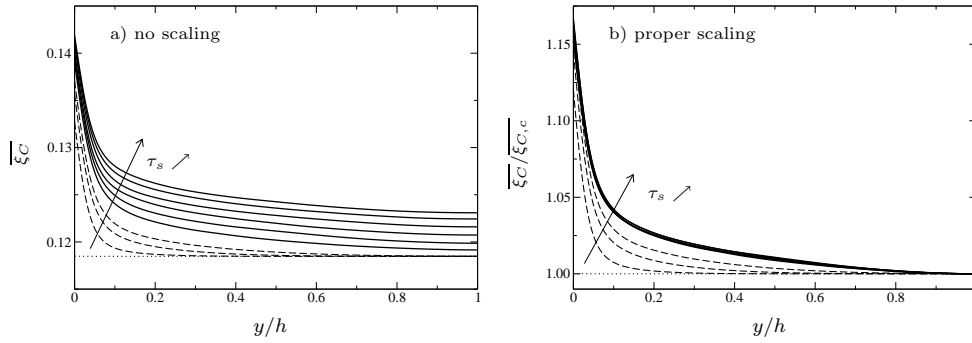


Figure 6.9 : Atomic molar fraction profiles of atom C: a) without scaling; b) scaled by its centerline value. \cdots : inert wall (case I); $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s < \tau_d$; $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s > \tau_d$.

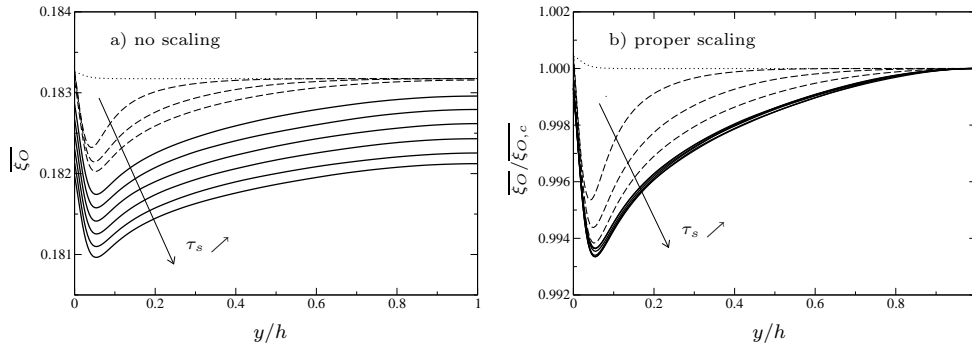


Figure 6.10 : Atomic molar fraction profiles of atom O: a) without scaling; b) scaled by its centerline value. \cdots : inert wall (case I); $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s < \tau_d$; $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s > \tau_d$.

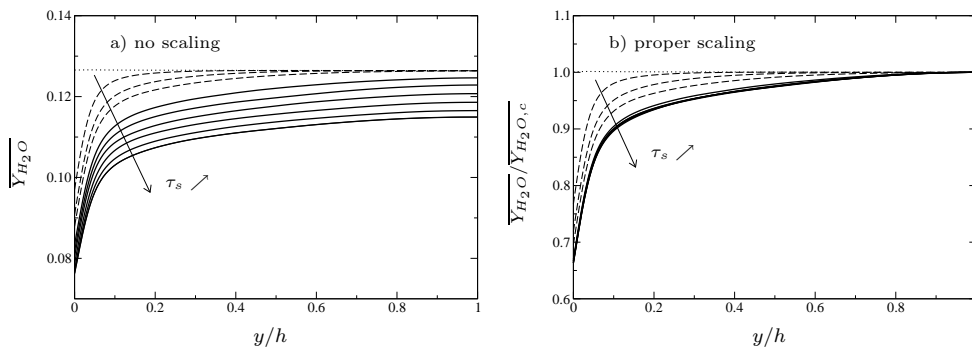


Figure 6.11 : Mass fraction profiles of species H_2O : a) without scaling; b) scaled by its centerline value. \cdots : inert wall (case I); $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s < \tau_d$; $---$: ablative wall simulation (case A2) for $\tau_s > \tau_d$.

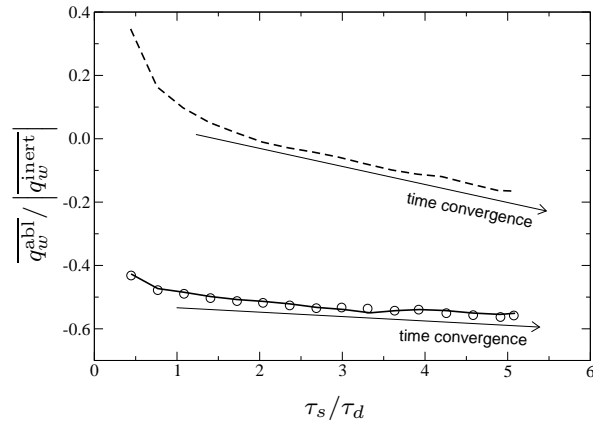


Figure 6.12 : Time convergence of the total wall heat flux for ablative surface simulations, $\overline{|q_w^{abl}|}$, scaled by the mean modulus of the inert wall heat flux (case I). \circ : case A1; — : case A2; --- : case A3; --- : linear time convergence.

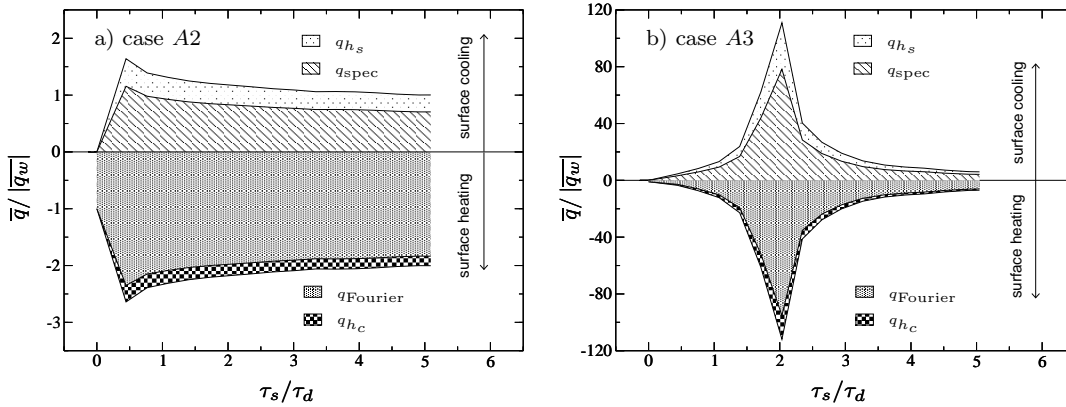


Figure 6.13 : Time convergence of the different wall heat flux contributions during the ablative wall simulations. Heat fluxes are scaled by the mean modulus of the total wall heat flux, $|\overline{q_w}|$. Results of case A1 are not presented because they are very similar to the ones of case A2.

the total wall heat flux also converges after $\tau_s = \tau_d$ for all the ablative wall simulations, when all the contributions of the total wall heat flux are analyzed, one finds that the time convergence is only reached for $\tau_s > 5\tau_d$. This is presented in figure 6.13 where the time evolution of the Fourier heat flux, q_{Fourier} , the heat flux due to molecular species diffusion, q_{spec} , the sensible enthalpy heat flux, q_{h_s} , and the chemical enthalpy flux, q_{h_c} , are plotted with a cumulative representation (the question of heat flux balance is presented further in section 6.4.3 where the decomposition of each term is clearly explained). All the values are scaled by the modulus of the total wall heat flux presented in figure 6.12. This explains the sharp peak obtained at around $\tau_s = 2\tau_d$ for case A3 since the total wall heat flux crosses the zero value for this time of observation.

Finally, the statistics presented hereafter are performed at a simulated time $\tau_s = 5\tau_d$. This criterion insures a good convergence of the statistics for any variable of interest in the present study. All the ablative wall simulations are thus stopped at about $\tau_s = 5\tau_d$ ($\tau_s \approx 20\tau_d$ for the inert wall simulation). This justifies not to take into account the geometrical deformation of the computational domain since during this simulated period the relative variation of the channel half-height, $\Delta h/h$, is around 0.01%. Indeed, considering the most constraining simulation (case A3) for which the time averaged injection velocity is about $v_{inj}^+ \approx 0.004$, taking $\rho_c \approx 1900 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ and $\rho_w \approx 7 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, one finds that $\Delta h/h = \dot{r}_c/\tau_s = 5v_{inj}^+\rho_w/\rho_c \approx 0.007\%$.

6.4 Flow structure analysis

6.4.1 Species conservation analysis

We have shown in the previous section 6.3 that scaling the species mass fraction profiles by their centerline value was an appropriate procedure to analyze species conservation. This is done in figure 6.14 where the mass fraction profiles of the oxidizing species H_2O and CO_2 are presented so as the species CO which is relevant to the activity of the global oxidation scheme since this species is produced by both oxidation reactions considered in this study. One first sees in figure 6.14 that the mean flow is at chemical equilibrium states in all cases (the equilibrium state has been computed *a priori* thanks to CHEMKIN software specifying the local mean concentrations, pressure and temperature). One recalls that this behavior is not numerically imposed by the code since one makes use of a seven chemical reaction mechanism to describe the flow chemical kinetics. This result is also valid for the other species (not shown herein), which means that the characteristic chemical time scale is negligible compared to the turbulent time scale (i.e. the Damköhler number is high) in the present simulations.

Comparing inert and ablative cases, one also observes that the heterogeneous reactions drastically change the species concentration profiles because of the species consummation/production features of the ablation process: the more oxidation reactions are intense, the more concentration profiles deviate from the inert wall reference case. This is visible in case A3 for which the in-

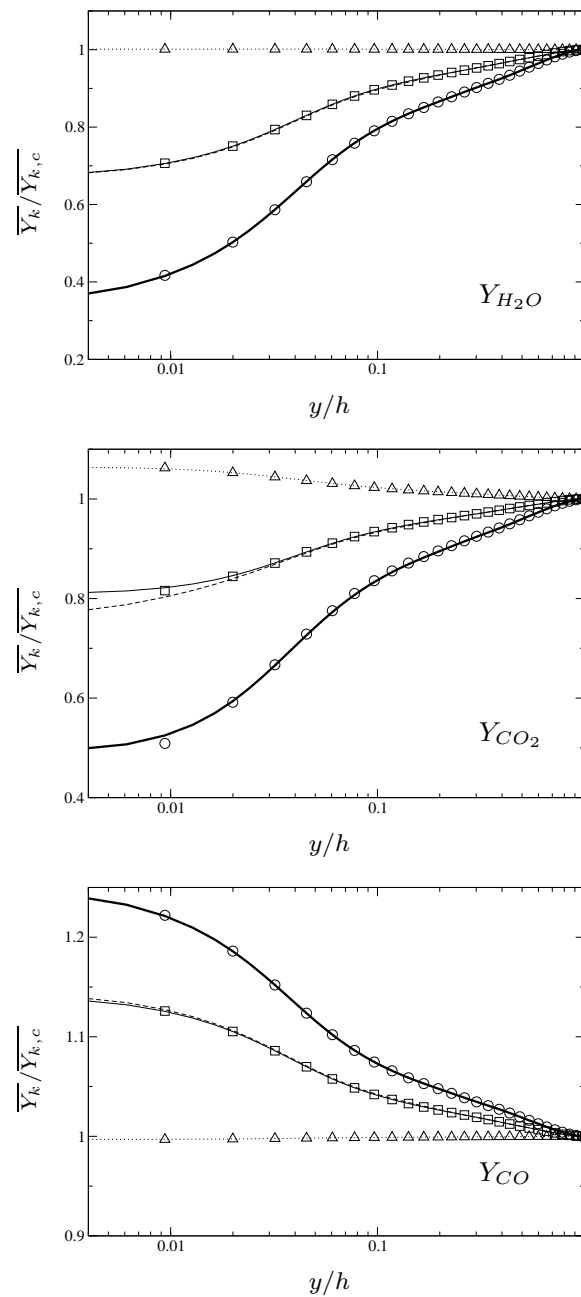


Figure 6.14 : Mean mass fraction profiles of H_2O , CO_2 and CO species scaled by their centerline value, $\overline{Y_{k,c}}$. Lines represent the DNS results, symbols the equilibrium state computed with CHEMKIN software. The same symbol is used for case A1 and A2 because their equilibrium states are very close. (....., Δ): inert case; (—, \square): case A1; (---, \square): case A2; (—, \circ): case A3.

jection velocity is stronger. Note that the difference between case $A1$ and $A2$ are negligible in our simulations. This is mainly due to the fact that the molar concentration of CO_2 species at the wall is one order of magnitude less than the one of H_2O . As a consequence, the second oxidation reaction slightly modify the species conservation process. This result is also visible in figures 6.8 and 6.12 that clearly indicates no differences in the time evolution of the Stephan velocity and the total wall heat flux for the two simulations $A1$ and $A2$. Of course one cannot generalize this result since the concentration of oxidizing species at the wall directly depends on the initial concentration delivered by the initial condition. Within the present framework, this means that the only way to control the species concentration at the wall would be to perform another inert simulation changing the operating conditions, and/or the species composition used to initialize the computation. Note however in figure 6.14 that the flux of CO_2 species at the wall (measured by the profile derivative) is not null for case $A2$ since the consummation of this species is allowed by the oxidation scheme. For all other simulations, this flux is well null which indicates that the simulations behaves properly even if the flow is weakly sensitive to the second oxidation reaction.

6.4.2 Momentum conservation balance

For the inert wall simulation, the average procedure in the homogeneous directions applied to the momentum conservation equation in the streamwise direction leads to the following expression:

$$\frac{d}{dy} \left(\underbrace{\underbrace{\overline{\mu \frac{du}{dy}}}_{\tau_{\text{lam}}} - \underbrace{\overline{\rho u'' v''}}_{\tau_{\text{tur}}}}_{\tau_{\text{tot}}} \right) = -\overline{\mathcal{S}_x} \quad (6.31)$$

which differs from the expression obtained for the ablative wall configurations since in these latter cases the time derivative must be conserved. and because of the injection velocity at the wall that implies $\tilde{v} \neq 0$ (contrary to the inert wall configuration for which the continuity equation and the no-slip condition at the wall allow to find that $\tilde{v} = 0$):

$$\frac{d}{dy} \left(\underbrace{\underbrace{\overline{\mu \frac{du}{dy}}}_{\tau_{\text{lam}}} - \underbrace{\overline{\rho u'' v''}}_{\tau_{\text{tur}}} - \underbrace{\overline{\rho \tilde{u} \tilde{v}}}_{\tau_{\text{conv}}}}_{\tau_{\text{tot}}} \right) = -\overline{\mathcal{S}_x} + \frac{\partial \overline{\rho \tilde{u}}}{\partial t} \quad (6.32)$$

In equations (6.31) and (6.32), τ_{lam} stands for the laminar viscous shear stress, τ_{tur} the turbulent shear, τ_{conv} the convective shear, τ_{tot} the total shear, and $\overline{\mathcal{S}_x}$ the constant source term that compensates for the streamwise pressure gradient vanishing in periodic channel flow configurations.

Since case $A3$ is the most constraining regarding to momentum conservation, it has been retained in figure 6.15 to illustrate the differences between the momentum conservation of inert wall

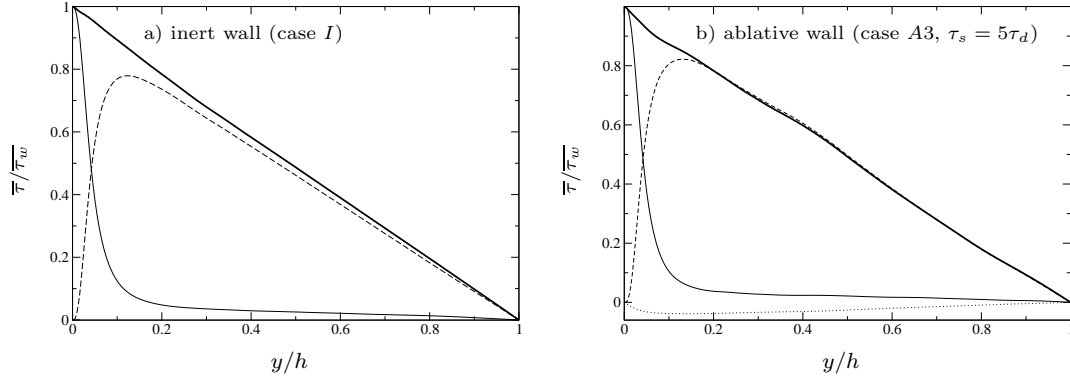


Figure 6.15 : Momentum balance scaled by the mean total shear stress at the wall, $\bar{\tau}_w$. a) inert wall case referring to Eq. (6.31); b) ablative wall case referring to Eq. (6.32). — : laminar stress, $\tau_{lam} = \mu \frac{du}{dy}$; - - - : turbulent stress, $\tau_{tur} = -\bar{\rho} \widetilde{u''v''}$; : convective stress, $\tau_{conv} = -\bar{\rho} \widetilde{u} \widetilde{v}$; — : total shear stress, τ_{tot} .

and ablative wall configurations. The -1 slope of the total shear stress for the inert wall simulation (see figure 6.15-a) is imposed by the source term which is constant in space. This slope is also recovered for the ablative wall simulations (see figure 6.15-b), which shows that the unsteady term of Eq. (6.32) is also constant in space. This indicates that the time convergence is verified for this balance, and that one observes the time auto-similar behavior of boundary layer, as desired. The unsteady term is less than 1% of the source term for all the DNS's, and thus negligible in the balance. Moreover, one observes that the convective term introduced by the ablation process (namely $-\bar{\rho} \widetilde{u} \widetilde{v}$) keeps small values. Indeed, the mass flux ratio $F = \frac{\overline{\rho_w v_{in,j}}}{\overline{\rho_b u_b}}$ (b -subscripted variables referring to bulk values) of the current ablative surface simulations is too low compared to classical blowing surface studies [212, 235] to change the shear stress conservation balance: $F \approx 0.01\%$ for cases A1 and A2, $F \approx 0.02\%$ for case A3. The convective term is thus negligible, virtually leading to the same shear stress conservation mechanism for both inert and ablative wall turbulent boundary layers. This conclusion is supported by the analysis of the root-mean-square velocity fluctuations presented in figure 6.16. Indeed, the comparison between the inert case and the most constraining simulation regarding blowing effect (case A3) reveals almost no differences between the two flows. The velocity fluctuations are slightly increased by the surface blowing which has also been reported by Sumitani and Kasagi [235]. However, the present mass flux ratio is about 20 times lower than the one of their study (in which $F \approx 0.4\%$) to observe major differences and notably the displacement of the fluctuation peaks toward the wall.

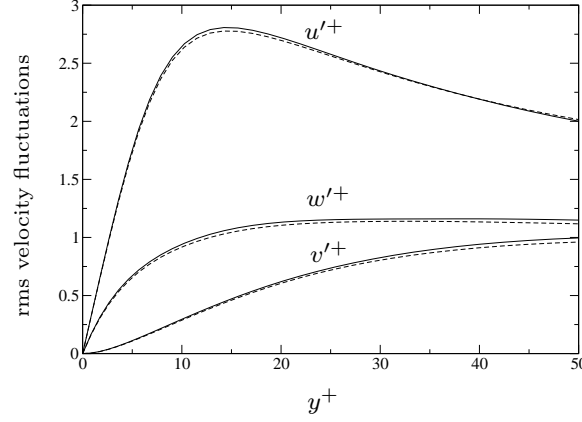


Figure 6.16 : Root-mean-square velocity fluctuations scaled by \bar{u}_τ . Comparison between inert wall and ablative wall cases (case A2 and A2 are not shown here because the differences with inert wall simulation are even less visible). - - - - : inert wall, case I; — : ablative wall, case A3.

6.4.3 Energy conservation balance

Neglecting the power of pressure forces and the viscous effect [35], the same analysis procedure is applied to the specific enthalpy conservation equation and leads to the following equation for the inert wall configuration:

$$\frac{d}{dy} \left(\underbrace{\underbrace{-\lambda \overline{dT/dy}}_{q_{\text{Fourier}}} + \underbrace{\bar{\rho} \sum_k \{h_k Y_k V_{k,y}\}}_{q_{\text{spec}}} + \underbrace{\bar{\rho} \widetilde{v'' h''_s}}_{q_{n_s}} + \underbrace{\bar{\rho} \sum_k \widetilde{v'' Y''_k} \Delta h_{f,k}^0}_{q_{n_c}}}_{q_{\text{tot}}} \right) = \bar{Q} \quad (6.33)$$

and to the following one for ablative surface:

$$\frac{d}{dy} \left(\underbrace{\underbrace{-\lambda \overline{dT/dy}}_{q_{\text{Fourier}}} + \underbrace{\bar{\rho} \sum_k \{h_k Y_k V_{k,y}\}}_{q_{\text{spec}}} + \underbrace{\bar{\rho} (\widetilde{v'' h''_s} + \widetilde{v h_s})}_{q_{n_s}} + \underbrace{\bar{\rho} \sum_k (\widetilde{v'' Y''_k} + \widetilde{v Y_k}) \Delta h_{f,k}^0}_{q_{n_c}}}_{q_{\text{tot}}} \right) = \bar{Q} + \frac{\partial (\bar{p} - \bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} \quad (6.34)$$

where the operator $\{\cdot\}$ represents a Favre averaged quantity, q_{h_s} is the heat flux of sensible enthalpy, q_{h_c} the heat flux of chemical enthalpy, q_{Fourier} the Fourier heat flux, q_{spec} the heat flux of species diffusion, \overline{Q} the space constant enthalpy source term that warms the fluid to sustain the mean temperature. Figure 6.17 presents each term of the total heat flux balance for the inert wall case (figure 6.17-a), and for ablative wall cases *A2* and *A3* at $\tau_s = 5\tau_d$ (figures 6.17-b and 6.17-c, respectively). Note that the balances of case *A1* is not presented since it is very similar to the one of case *A2*, leading to the conclusion that the second oxidation reaction has little influence on the heat flux conservation in our simulations. The total heat flux is linear through the boundary layer indicating that the unsteady term of Eq.(6.34) is a space constant at this time of observation (one recalls that this term is null for the inert DNS). Comparing inert and ablation cases, strong differences are visible notably because of the blowing effect of the ablation process. Indeed, for inert walls the no-slip boundary condition at the wall combined with the continuity equation imposes that $\tilde{v} = 0$. This is not the case for the ablative wall DNS. In addition, the diffusion velocities are not null at the ablative wall. As a consequence, none of the terms of the heat flux balance are null (neither negligible) at the ablative wall whereas the Fourier heat flux is the only contribution in the inert case.

The changes induced by the heterogeneous reactions are not as important on the shear stress conservation since the convective term arising in the momentum balance is null at the wall (because of the null wall tangential velocity). Hence, one can postulate that for low wall normal injection velocity, the shear stress conservation process is not as changed as the heat flux conservation one. For the present simulations, this implies that we should mainly focus on the changes induced on heat fluxes conservation for improving the understanding of turbulent boundary layer with wall ablation.

Comparing cases *A2* and *A3*, one observes that the repartition of the fluxes composing the total heat flux are strongly modified depending on the injection velocity. This is also illustrated by table 6.4 that gives the importance of each heat flux at the wall. This table shows that a stronger injection velocity induces stronger disparities of the fluxes at the wall. Looking at the heat flux balances presented in figure 6.17, one finds that the sensible enthalpy and multicomponent fluxes tend to cool the surface, whereas the Fourier and the chemical enthalpy fluxes contribute to surface heating (see also figure 6.13 where this feature is also visible). The wall surface is globally heated but table 6.5 indicates that the wall surface would receive a stronger total heat flux if heterogeneous reactions were not present : thanks to surface ablation the total wall heat flux is divided by a factor 1.8 in cases *A1* and *A2*, and by a factor 6.2 for case *A3*. One also notices in table 6.5 that the value of the injection velocity directly influences the surface cooling effect of ablation since the total specific enthalpy flux has been divided by a factor 4.3 in case *A3*, compared to case *A1* and *A2*.

Investigating the case of surface ablation necessarily refers to multicomponent transport modeling, and notably to the questionable role of the Dufour heat flux. Indeed, if the Dufour effect

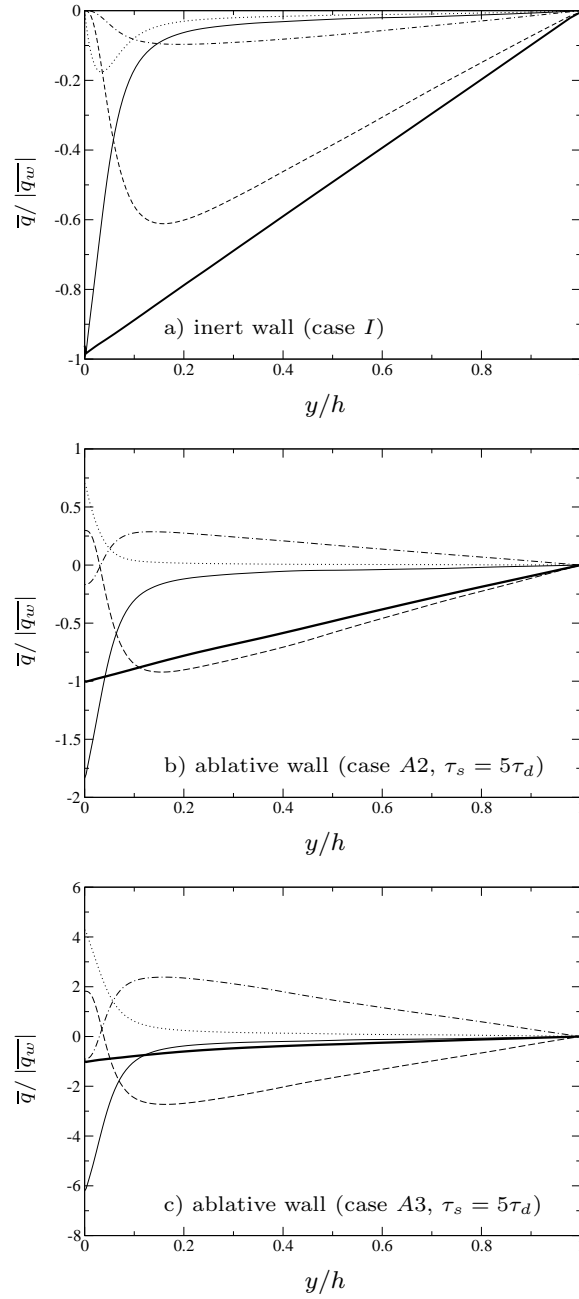


Figure 6.17 : Heat flux balance scaled by the modulus of the flux at the wall $|\bar{q}_w|$. - - - - : flux of sensible enthalpy, q_{h_s} ; - · - : flux of chemical enthalpy, q_{h_c} ; — : Fourier heat flux, $q_{Fourier}$; ····· : species diffusion flux, q_{spec} ; ——— : total heat flux, q_{tot} .

case	$q_{h_s}/ \overline{q_w} $	$q_{h_c}/ \overline{q_w} $	$q_{\text{spec}}/ \overline{q_w} $	$q_{\text{Fourier}}/ \overline{q_w} $
inert	0%	0%	0%	-100%
A1	29.2%	-16.5%	68.1%	-180.8%
A2	29.8%	-16.8%	70.4%	-183.4%
A3	181.9%	-90.6%	429.2%	-620.3%

Table 6.4 : Decomposition of the mean total wall heat flux. Results are scaled by the modulus of the mean total wall heat flux, $|\overline{q_w}|$.

case	$\overline{q_w^{\text{case}}}/\overline{q_w^{\text{inert}}}$
A1	56%
A2	55%
A3	13%

Table 6.5 : Total wall heat flux of the ablative wall cases scaled by the mean total heat flux of the inert case, $\overline{q_w^{\text{inert}}}$.

were considered in the molecular heat flux, Eq. (6.7) would have been replaced by the following one:

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{Fourier term}} + \underbrace{\rho \sum_k h_k Y_k V_{k,i}}_{\text{species diffusion}} + \underbrace{p \sum_k \chi_k V_{k,i}}_{\text{Dufour term}} \quad (6.35)$$

where χ_k are the species thermal diffusion ratios. To quantify the importance of the Dufour term in the simulations, the EGLIB library [70, 71] has been used to evaluate the thermal diffusion ratios and the Dufour part has been rebuilt *a priori* using the data of the DNS's for p and $V_{k,i}$. The resulting profile of the wall normal component of the Dufour term, $\overline{q_{\text{Dufour}}}$, has been plotted in figure 6.18 for all the simulations.

Hence, the Dufour heat flux is stronger for the ablative wall cases and notably when the surface oxidation is more intense (see case A3). One observes a slight difference between case A1 and A2 in the vicinity of the wall because the species diffusion velocities, proportional to the species concentration wall normal gradients (see Eq. (6.8)), are not identical since the mass fraction gradient of species CO_2 is not null for case A2. This feature has been presented in figure 6.14 and should also explains the negligible differences observed in tables 6.4 and 6.5 between cases A1 and A2. In the region $y/h > 0.2$ the Dufour effect clearly has no influence whatever the case is, never exceeding 1% of the total wall heat flux. In the near wall region, its influence is also limited (only 3% of the total wall heat flux for case A3). Note that its maximum of influence arises at the wall for ablative wall cases whereas it is displaced just above the wall for inert wall case. Finally, the global analysis of figure 6.18 allows to conclude that the Dufour effect is negligible for the

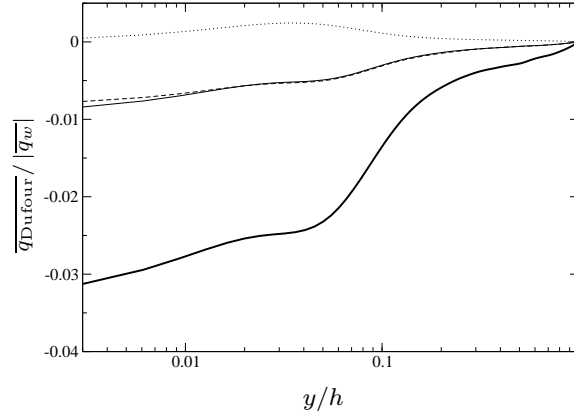


Figure 6.18 : A priori computation of the Dufour heat flux scaled by the modulus of the mean total heat flux at the wall $|\overline{q_w}|$. For ablative wall simulations, the results are presented for $\tau_s = 5\tau_d$.
 : inert wall, case I; — : ablative wall, case A1; - - - : ablative wall, case A2; — : ablative wall, case A3.

present boundary layers. However, because the thermal diffusion ratios depends on the mixture composition, this conclusion stands for the present study but would need further examination for any other mixture.

6.4.4 Atom conservation balance

Investigating the conservation mechanism of multicomponent flows is often a hard task because of the number of species conservation equations and of the chemical source terms, $\dot{\omega}_k$, that couple the equations all together via the chemical kinetic scheme. For this reason, it can be convenient to investigate the conservation mechanism of atomic elements because no atomic production/consumption arises in the flow itself. In other words, the atomic conservation equations are not coupled to each others because the atomic source term vanishes (the chemical kinetic scheme only redistributes the species concentration while conserving the atomic composition). This type of decoupled variables is often referenced as Shvab-Zel'dovich variables [253]. Hence, the atomic conservation equations can be build starting from the species conservation equation (6.2), multiplying it by:

$$M_{a,k} = n_{a,k} \frac{W_a}{W_k} \quad (6.36)$$

where $n_{a,k}$ represents the number of atoms a contained in one species k , and W_a is the atomic weight of element a . Summing over all the species, and applying the ensemble average, it is possible to find an expression for atomic mass fraction conservation in the turbulent boundary

layer:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\underbrace{\sum_k M_{a,k} \bar{\rho} \widetilde{Y}_k \widetilde{V}_{k,y}}_{\phi_{\text{lam},a}} + \underbrace{\bar{\rho} \widetilde{v''} \widetilde{\psi''}_a}_{\phi_{\text{tur},a}} + \underbrace{\bar{\rho} \widetilde{v} \widetilde{\psi}_a}_{\phi_{\text{conv},a}} \right) = \bar{\omega}_a \quad (6.37)$$

In this expression, ψ_a stands for the atomic mass fraction of atom a , and $\bar{\omega}_a = -\partial \bar{\rho} \widetilde{\psi}_a / \partial t$ is the source term of atom a . One recognizes a classical conservation law where $\phi_{\text{lam},a}$ is the laminar flux of atom a , $\phi_{\text{tur},a}$ the turbulent flux, and $\phi_{\text{conv},a}$ the convective flux. Compared to the classical species conservation equation, this formulation presents the advantage of reducing the number of conservation equations to investigate (4 atomic element equations against 7 species equations in the present study).

Hence, the balances of atomic mass fraction fluxes are plotted for each atom in figures 6.19, 6.20 and 6.21, for both inert and ablative wall cases. The case $A1$ is not presented because it leads to the same conclusions as other ablative wall cases $A2$ and $A3$. Concerning the inert wall simulation (figure 6.19), the atomic conservation process is merely reduced to a balance between the laminar and the turbulent fluxes since the convective term and the atomic source term, $\bar{\omega}_a$, are null in this situation. The atomic fluxes for inert wall (figure 6.19) are scaled by the mean total atomic mass fraction flux of carbon atom at the ablative wall case $A2$, $\overline{\phi_{C,w}^{\text{case } A2}}$, because the flux of carbon atom is null at the wall for the inert case. Moreover, this scaling allows to illustrate that there is approximatively two orders of magnitude between the fluxes of the inert wall case and the ablative wall case $A2$ which explains that the atomic composition remains constant in the inert wall configuration [35]. This was previously show in figures 6.9 and 6.10.

The structure of the atomic balances for ablative wall cases are very different since the convective term and the source term are both active. From a qualitative point of view, one can observe in figures 6.20 and 6.21 that the wall normal variation of the laminar and the turbulent atomic fluxes seem to be of classical type when surface ablation occurs (see the shear stress balance Fig. 6.15 as a comparison). Note also that normalizing the fluxes by $\overline{\phi_{C,w}}$ seems to be an appropriate scaling to compare the ablative wall cases since the plots of figures 6.20 and 6.21 are almost identical. Furthermore, these figures illustrate that the conservation balance of atom C is different from the other ones. The difference is due to the atomic source term which is null for atoms H , O , and N (no production or consummation of these atoms can arise in the turbulent boundary layer), whereas the heterogeneous reactions transform the carbon of solid surface into gaseous species containing carbon atoms. The latter process acts like a production source term of carbon atoms injected from the wall surface towards the flow. As a consequence, one observes a -1 slope on the total carbon flux balance which is replaced by a constant value for other atoms (of course the value of this constant is zero because no flux of these atoms arises). Note that the constant slope observed for the total atomic flux of atom C is due to the fact that the balances have been performed at a converged time for which the time derivatives are constant in space.

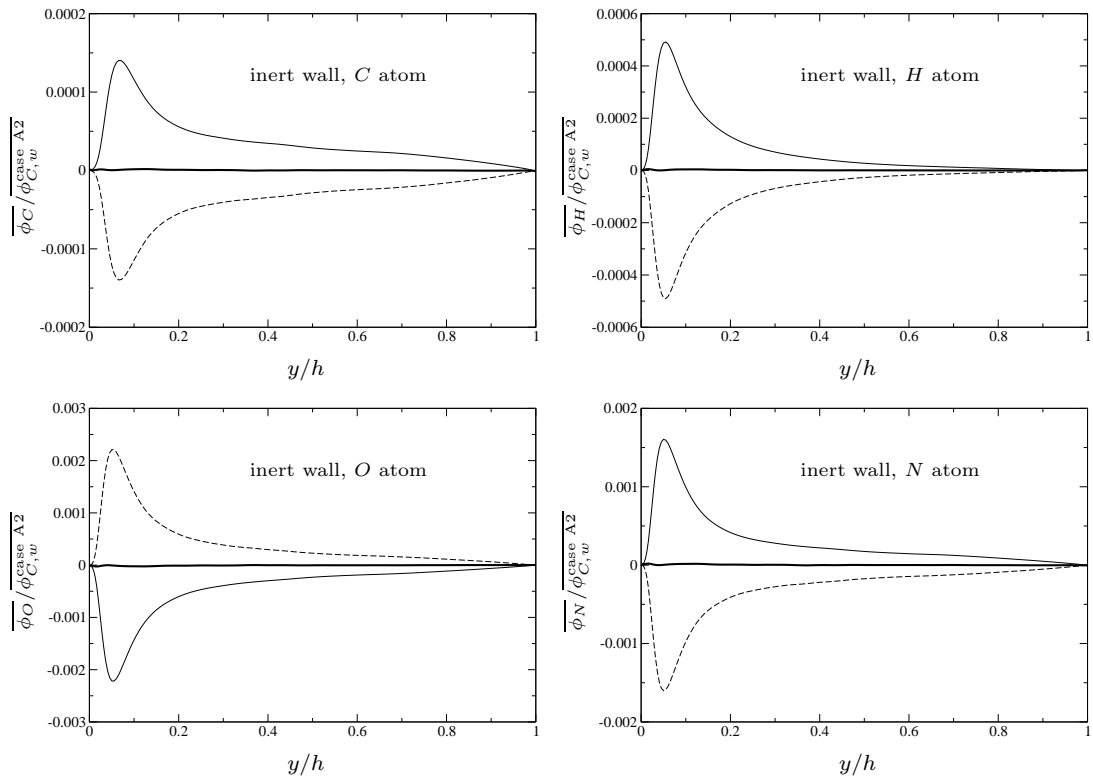


Figure 6.19 : Atomic flux balance for case I. Fluxes are scaled by the mean total atomic mass fraction flux of carbon atom at the ablative wall case A2, $\overline{\phi_{C,w}^{case A2}}$, since $\overline{\phi_{C,w}}$ is null in the inert wall configuration. — : laminar flux, $\phi_{lam,a}$; - - - : turbulent flux, $\phi_{tur,a}$; — : total atomic flux, $\phi_{tot,a} = \phi_{lam,a} + \phi_{tur,a}$.

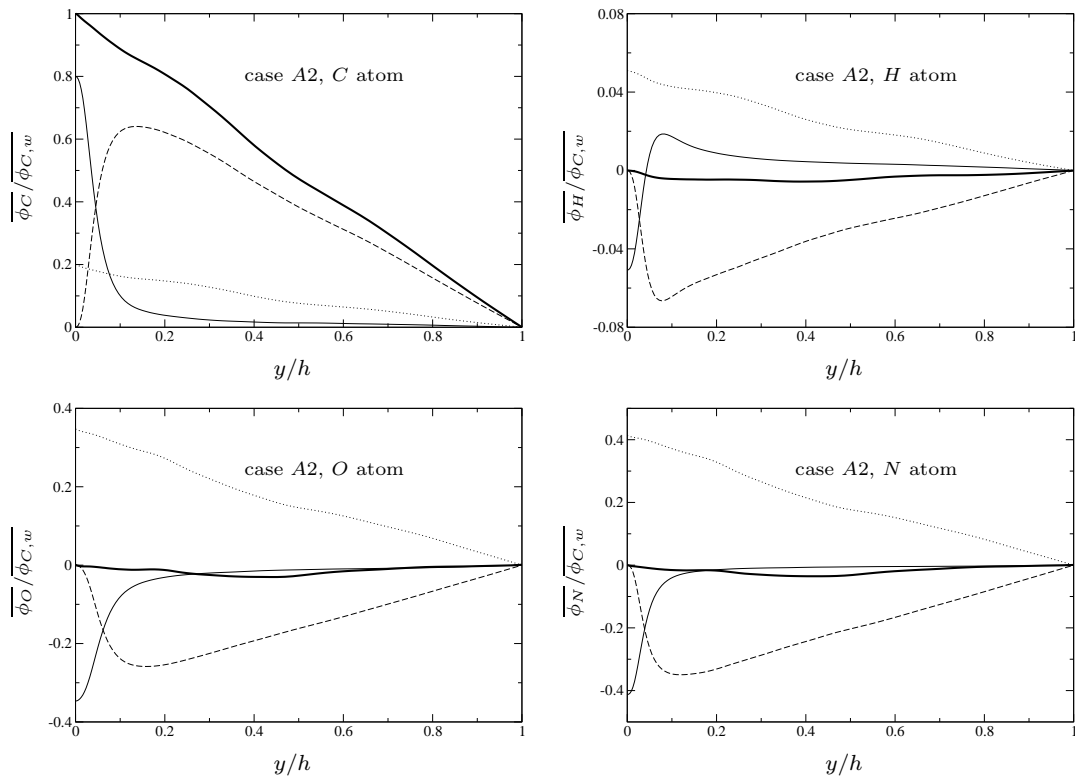


Figure 6.20 : Atomic flux balance for case A2 at $\tau_s = 5\tau_d$. Fluxes are scaled by the mean total atomic mass fraction flux of carbon atom at the wall $\overline{\phi_{C,w}}$. — : laminar flux, $\phi_{lam,a}$; - - - : turbulent flux, $\phi_{tur,a}$; : convective flux, $\phi_{conv,a}$; — : total atomic flux, $\phi_{tot,a} = \phi_{lam,a} + \phi_{tur,a} + \phi_{conv,a}$.

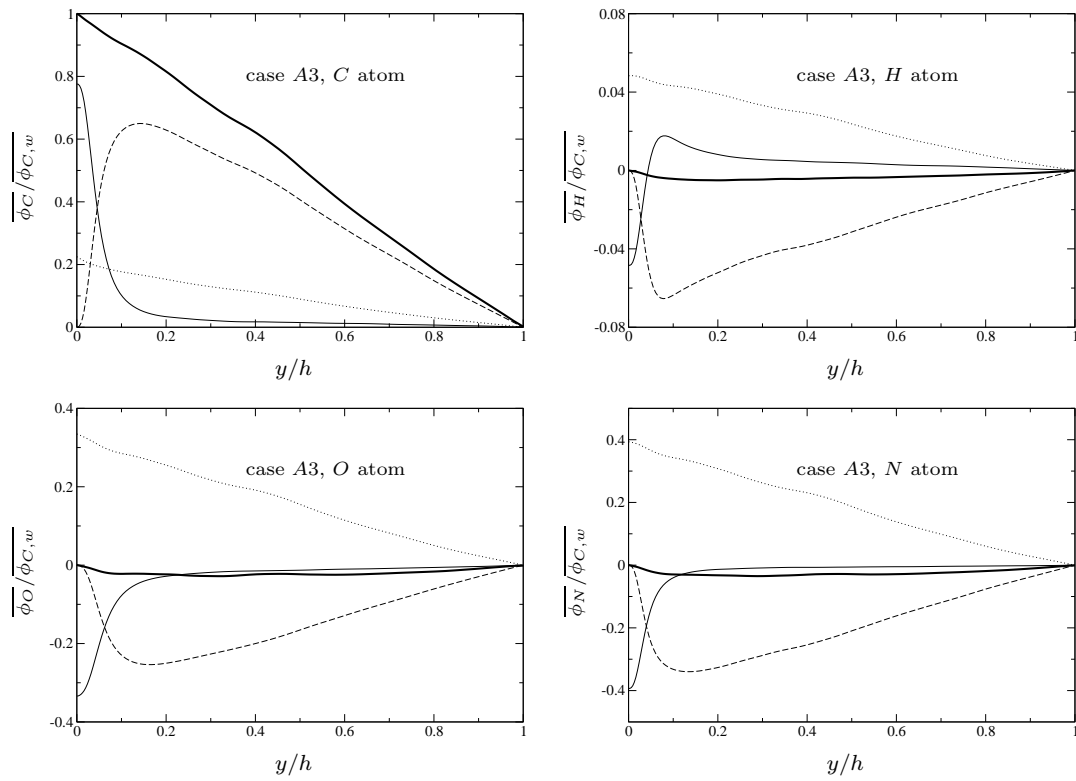


Figure 6.21 : Atomic flux balance for case A3 at $\tau_s = 5\tau_a$. Fluxes are scaled by the mean total atomic mass fraction flux of carbon atom at the wall $\overline{\phi_{C,w}}$. — : laminar flux, $\phi_{lam,a}$; - - - : turbulent flux, $\phi_{tur,a}$; : convective flux, $\phi_{conv,a}$; — : total atomic flux, $\phi_{tot,a} = \phi_{lam,a} + \phi_{tur,a} + \phi_{conv,a}$.

Finally, since the turbulent atomic flux is null at the wall, one can verify that the convective and the laminar diffusive fluxes strictly compensate each other at the wall surface for atoms H , O , and N . Indeed, the heterogeneous reaction mechanism is fed by laminar atomic fluxes, and delivers a convective atomic flux towards the flow. Regarding to carbon atom, one understands that this mechanism is superposed to a convective mechanism ejecting carbon atoms taken from the solid surface towards the boundary layer. The resulting total carbon flux at the wall thus characterizes the solid surface recession.

6.5 Conclusions

This study presents a generic method for performing DNS's of periodic channel flow with ablative walls. A boundary condition for DNS has been developed and used to prescribe the wall normal fluxes of momentum and species induced by the surface heterogeneous reactions. The analysis of the generated data is made easier if the time dependancy can be neglected, which appears to be the case in the present study after a few diffusion times. Making use of ensemble averages to improve the statistical convergence, some particular features of ablative wall turbulent boundary layers have been analyzed such as the chemical equilibrium of the mixture, the effect of the injection velocity on the shear stress and heat flux balances, and the surface cooling effect of wall ablation. It appears that the second surface oxidation reaction (oxidation of carbon material by CO_2 species) has no influence on the flow structure and the wall fluxes, mainly because the concentration of CO_2 is low in the present simulated mixture. Moreover, the present database allows to study the influence of the Stephan velocity: a higher injection velocity leads to a different repartition of the wall flux contributions, resulting in a more cooled material. However, the tested Stephan velocities, typical of SRM applications, are not strong enough to modify the shear stress conservation mechanism (the convective term arising in the momentum conservation equation remains negligible). Finally, an atomic mass fraction conservation equation of Shvab-Zel'dovich type is derived and used to analyze the atomic fluxes in terms of laminar, turbulent and convective contributions. The balances of atomic element fluxes appear to be very similar to the one of a passive scalar.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the CINES for the access to supercomputer facilities, and want to thank the support and expertise of Snecma Propulsion Solide.

CHAPITRE 7

Modèle de paroi avec prise en compte de l'ablation

La suite des travaux présentés dans le chapitre précédent a conduit à l'élaboration d'un modèle de paroi pour la prescription des flux pariétaux dans ce genre de configuration. Un schéma global décrivant l'intégration du modèle dans une chaîne de calcul dédiée à la conception des tuyères a été imaginé. Le modèle de paroi intervient à l'interface de communication entre un code de calcul capable de résoudre l'écoulement à l'intérieur du moteur, et un code pour la prédiction du comportement thermo-mécanique de la tuyère. La mise en place de cette chaîne est dès à présent envisageable.

Ce chapitre est classé confidentiel. Son contenu n'est donc pas accessible dans cette version du manuscrit.

Conclusion générale

Les tuyères des moteurs à propergol solide sont soumises à des flux thermiques très intenses qui résultent des conditions thermodynamiques sévères dans lesquelles se produit la combustion. Afin d'assurer leur résistance thermo-mécanique, les parois des tuyères sont revêtues de matériaux isolants et protecteurs sujets au phénomène d'ablation. Pour accompagner le dimensionnement thermo-ablatif des tuyères, une chaîne de calcul numérique est actuellement en cours de développement par Snecma Propulsion Solide et l'ONERA. La prédiction des flux pariétaux étant au coeur de ces méthodes numériques, il est indispensable d'utiliser des modèles fiables et prédictifs permettant de prendre en compte les différentes particularités physiques auxquelles sont soumises les couches limites qui se développent sur ces tuyères. Dans cette optique, le travail réalisé au cours de cette thèse a permis de progresser sur plusieurs fronts.

Dans une première partie, on montre le développement d'une loi de paroi pour surfaces inertes. Ce modèle intègre plusieurs effets physiques tels que la prise en compte de mélanges multi-espèces réactifs, à nombre de Prandtl non-unité, et sujets à une dilatabilité importante. Cette loi de paroi a été développée à partir de données de référence générées par simulations numériques directes en canal plan périodique. Grâce à ces calculs nous avons pu vérifier l'ensemble des hypothèses sur lesquelles repose le modèle, notamment concernant l'aspect multi-espèces de l'écoulement gazeux : 1) l'approximation de Hirschfelder et Curtiss avec vitesse de correction semble suffisante pour décrire la diffusion moléculaire des espèces ; 2) l'effet Soret (vitesse de thermophorèse) peut être négligé ; 3) le flux de Dufour ne contribue que faiblement au flux de chaleur pariétal total et peut donc être négligé. Ces résultats apportent des éléments essentiels pour le choix des modèles physiques à retenir dans le code de mécanique des fluides. On présente également une extension possible de la loi de paroi pour surfaces inertes afin de

prendre en compte les transferts radiatifs. Il ressort de l'étude effectuée que la contribution radiative reste faible dans le flux de chaleur pariétal total (de l'ordre de 10%), et que les termes radiatifs ne modifient pas la structure de l'écoulement. Les hypothèses qui ont servi au développement du modèle sont toujours valides, la même loi de paroi est donc utilisable, à condition d'ajouter le flux radiatif au flux de chaleur pariétal initialement prédit par le modèle.

La question du gradient de pression longitudinal est aussi abordée dans ce travail. L'examen d'un jeu de données fourni par Snecma Propulsion Solide révèle que le gradient de pression favorable qui agit à l'intérieur des tuyères contribue à une stabilisation de l'écoulement, voire à une relaminarisation lorsque la tuyère est géométriquement compacte. Ce constat ouvre la porte vers une extension possible du modèle de paroi : pour chaque itération du code de calcul, on peut mesurer numériquement la valeur locale prise par le paramètre d'accélération, et en déduire si la loi turbulente est utilisable, ou si on doit basculer sur la version laminaire de la loi de paroi.

Finalement, on réalise une série de tests *a posteriori* qui mettent à l'épreuve une version simplifiée cette nouvelle loi de paroi, dans une situation où un écoulement mono-espèce est soumis à un gradient de température significatif. Une large gamme de rapports entre température de mélange et température de paroi est examinée, $0.5 < T_b/T_w < 5$. Les données de référence manquant pour ce genre d'écoulement, on se base essentiellement sur des corrélations empiriques pour évaluer la qualité du modèle. Ces tests mettent en évidence l'apport considérable de la formulation développée par rapport à une loi de paroi classique : l'erreur sur la prédiction du frottement semble se stabiliser avec la nouvelle loi, autour de 15%, alors qu'elle ne fait qu'augmenter avec le rapport de température pour la loi de paroi classique (qui commet environ 80% d'erreur pour $T_b/T_w = 5$). On constate le même comportement sur la prédiction du flux de chaleur : l'erreur est de l'ordre de 5% pour le nouveau modèle, alors qu'elle atteint 60% pour $T_b/T_w = 5$.

Dans une seconde partie, on s'intéresse au caractère ablatif des parois. On dérive tout d'abord une solution analytique pour un écoulement laminaire sur paroi ablatable. Cette vision analytique permet d'étudier les paramètres fondamentaux qui pilotent le processus d'ablation. On utilise également cette solution pour valider une condition limite spécifiquement développée pour réaliser des simulations numériques directes intégrant l'ablation des parois.

A partir d'une configuration de canal plan périodique, on introduit ensuite une méthode permettant d'obtenir des données de référence représentatives d'un écoulement sur paroi ablatable. On étudie alors le comportement physique de l'écoulement suivant deux critères : la nature des espèces chimiques oxydantes, et l'intensité des réactions hétérogènes de surface. Quel que soit le cas, il apparaît que la vitesse de soufflage résultant de l'ablation des parois ne modifie que très légèrement le bilan de quantité de mouvement et n'altère pas le frottement pariétal par rapport à une couche limite sur paroi inerte. En revanche, l'effet convectif lié au soufflage est suffisant pour modifier considérablement le flux de chaleur total qui pénètre dans le matériau carboné : on constate une réduction du flux total d'un facteur 2 à 10 suivant les cas étudiés. On propose enfin une analyse de la conservation atomique au sein de l'écoulement qui met en évidence un processus de conservation de type "scalaire passif" pour les fractions massiques atomiques.

Les données générées par simulation numérique directe servent finalement au développement

d'une loi de paroi pour surfaces ablatables. On présente alors un schéma global décrivant l'intégration du modèle dans une chaîne de calcul pour la conception des tuyères. La mise en place de cette chaîne est dès à présent envisageable (la description de ce modèle et de la chaîne de calcul ne fait pas partie de ce document pour des raisons de confidentialité).

• **Dans quelle direction améliorer les lois de paroi existantes ?**

Suite à l'étude bibliographique et aux travaux effectués dans cette thèse, il paraît essentiel de progresser dans la prise en compte de trois aspects physiques :

1. Le gradient de pression longitudinal : l'approche proposée qui consiste à basculer d'une loi turbulente vers une loi laminaire, et vice versa, mérite une exploration plus fine, notamment pour déterminer proprement le processus de transition de la loi turbulente vers la loi laminaire (l'utilisation d'une valeur-seuil bien définie du paramètre d'accélération mènerait à une transition un peu trop brutale entre les deux modèles). Pour améliorer la prise en compte du gradient de pression, on pourrait également regarder la possibilité d'inclure une approche à deux échelles de vitesse dans le modèle. Cette méthode, récemment proposée par Skote *et al.* [213, 214], également étudiée par Shih *et al.* [211, 210, 209], semble intéressante pour intégrer les effets de décollement dus à un gradient de pression défavorable. Son comportement n'a cependant pas encore été évalué concernant la prédiction de la relaminarisation de l'écoulement.
2. Le nombre de Mach de l'écoulement : il s'agit d'un ingrédient essentiel à inclure dans la loi de paroi si on veut traiter l'ensemble de la tuyère. L'enjeu pour les écoulements à nombre de Mach élevé est double : intégrer le terme d'échauffement visqueux dans le modèle du flux de chaleur pariétal, et capturer les variations de masse volumique (pour ce deuxième point on peut par exemple utiliser la transformée de Van Driest, déjà employée dans cette étude pour modéliser l'effet de dilatabilité du fluide). A partir de la méthode proposée par Huang *et al.* [97, 98], Artal [9] propose ainsi dans sa thèse une extension à tout nombre de Mach du modèle pour écoulement réactif sur paroi inerte. Il s'agit simplement d'une dérivation analytique qui ne repose pas sur la vérification des hypothèses fondatrices. Pour justifier ce modèle, des simulations numériques directes en régime supersonique ont aussi été effectuées dans cette thèse. Les résultats de ces calculs ne sont pas présentés dans ce manuscrit car l'analyse de cette configuration manque encore de maturité. On peut cependant dresser deux conclusions d'intérêt en termes de modélisation :
 - l'équilibre chimique de l'écoulement est perturbé car le temps caractéristique de mélange par la turbulence devient comparable au temps chimique de retour à l'équilibre (par rapport aux calculs en régime subsonique, l'échelle de temps de Kolmogorov prend deux ordres de grandeur en régime supersonique). L'hypothèse d'équilibre chimique n'est donc plus utilisable pour modéliser le flux de chaleur turbulent multi-espèces ;
 - la contribution du flux de chaleur turbulent multi-espèces devient négligeable comparativement au flux de chaleur turbulent.

Ces deux constats sont complémentaires et permettent de tirer la conclusion suivante : on peut s'affranchir du flux de chaleur turbulent multi-espèces lorsque le nombre de Mach est élevé. L'utilisation d'un modèle classique tel que celui proposé par Huang *et al.* [97, 98], paraît donc suffisant. Ces remarques devront être approfondies afin de conclure définitivement sur le traitement des zones à nombre de Mach élevé.

3. La rugosité des parois : cet élément, indissociable de la problématique d'ablation, devra être absolument considéré dans la loi de paroi finale. Pour les écoulements subsoniques, la prise en compte de la rugosité dans une loi de paroi consiste généralement à introduire une variable supplémentaire dans le modèle de longueur de mélange, qui se répercute ensuite sur la constante additive de la loi logarithmique [114]. La modification de la constante additive dépend alors de la géométrie des rugosités. Pour les écoulements supersoniques, le problème est plus complexe. On pourra par exemple regarder la méthode de PANT (pour *PAssive NoSetip Technology*) utilisée par le CEA/CESTA [69]. Cette approche consiste à définir expérimentalement une fonction de corrélation entre les flux pariétaux estimés sur paroi lisse et ceux obtenus sur paroi rugueuse. Ainsi, cette technique fournit une fonction de correction qui peut être appliquée comme une deuxième couche sur n'importe quel modèle de paroi pour surfaces lisses. La méthode a notamment été testée avec succès dans les travaux de thèse de Puigt [188]. D'une façon générale, la forme des rugosités dépend fortement de la nature du matériau avec lequel l'écoulement interagit : architecture homogène ou hétérogène, direction du tissage des fibres pour les matériaux composites. La rugosité qui en résulte ne peut donc pas être déterminée de façon analytique par simple intégration des équations de Navier-Stokes. L'utilisation de relations empiriques (telles que celles employées dans la méthode de PANT) semble donc indispensable pour aboutir à une prédiction correcte des flux pariétaux sur paroi rugueuse.

• Comment progresser dans le développement de nouveaux modèles de paroi ?

Le développement de nouveaux modèles en situation complexe manque foncièrement de données de référence accessibles dans la littérature. La plupart des études porte en effet sur des écoulements canoniques. A l'avenir, il faudra donc élargir la batterie des cas-tests de référence.

Si le calcul d'écoulement en canal périodique est un bon candidat pour étudier le phénomène d'ablation, cette configuration ne permet pas d'étudier par exemple l'effet du gradient de pression longitudinal. Pour obtenir des données pertinentes à ce sujet, on pourra par exemple mettre en place une simulation numérique de canal périodique avec une colline placée dans l'écoulement. Cette configuration est de plus en plus étudiée dans la littérature [77, 26] et se présente comme un cas de référence pour tester de nouveaux modèles de paroi [60, 238, 25, 24, 143, 155]. Pour l'instant, seuls des écoulements mono-espèces sans transfert de chaleur ont été appréhendés dans cette géométrie, mais on devrait pouvoir étendre facilement l'étude aux écoulements compressibles multi-espèces réactifs. Cette configuration est donc à considérer pour soumettre le modèle

de paroi à un écoulement décollé avec des zones de recirculation, mais ne permettra pas d'aborder le problème de la relaminarisation de la couche limite.

Pour étudier la relaminarisation, on pourra par exemple utiliser un calcul spatial de couche limite. Introduite par Spalart *et al.* [221, 18, 224], cette méthode permet de capter le développement spatial d'une couche limite. Pour y parvenir, cette approche emploie des conditions aux limites spécifiques dans la direction de l'écoulement : technique de recyclage spatial [142], ou utilisation d'une frange de forçage à la sortie du domaine de manière à forcer la périodicité de l'écoulement [172, 202]. L'avantage de cette configuration réside dans la liberté laissée à la condition limite imposée à l'extérieur de l'écoulement. Certaines études appliquent par exemple un gradient de pression défavorable pour étudier le phénomène de décollement [214]. De la même façon on pourra appliquer un gradient de pression qui varie spatialement, en accord avec le gradient de pression qui intervient dans une tuyère. On pourra ainsi capter la relaminarisation de l'écoulement et recueillir des données fiables pour étudier la transition du régime laminaire au régime turbulent. De plus, cette configuration est compatible avec la simulation d'écoulements supersoniques ce qui en fait le candidat privilégié pour étoffer la panoplie des cas de référence.

Concernant l'étude des rugosités, les méthodes expérimentales semblent mieux appropriées que les méthodes numériques. Non seulement car la définition d'une rugosité numérique virtuelle est délicate, mais surtout parce que la discrétisation spatiale de l'écoulement autour de ces rugosités augmente considérablement le nombre de points de calcul et nécessite l'emploi de méthodes numériques particulières (maillage non-structuré par exemple). De plus, dans le cadre de l'ablation des parois, les techniques expérimentales prennent intrinsèquement en compte le lien fort qui existe entre la nature du matériau et les structures turbulentes de l'écoulement. Des premières études numériques visant à simuler la formation des rugosités ont récemment été proposées par Aspa [10] et Velghe [244, 243], mais ces travaux restent à un stade embryonnaire qui ne permet pas encore d'intégrer l'ensemble des effets auxquels les matériaux sont soumis (pyrolyse ou érosion mécanique par exemple).

D'une manière générale, l'amélioration des lois de paroi développées passera surtout par une mise à l'épreuve de la méthode globale sur l'application finale. A ce stade, il semble en effet intéressant de réaliser des tests *a posteriori* sur un calcul de tuyère en situation réaliste. Ce diagnostic devrait mettre en évidence les points faibles des nouvelles lois de paroi en confrontant les résultats aux données récoltées par Snecma Propulsion Solide sur leurs propres tuyères : données expérimentales, données numériques obtenues avec la chaîne de calcul actuelle, et données numériques obtenues avec un calcul RANS bas-Reynolds.

• **A long terme, quelle stratégie utiliser pour la conception des tuyères ?**

Concernant la modélisation de la turbulence, les méthodes RANS actuellement utilisées sont tout à fait compétitives pour traiter l'écoulement à l'intérieur de la tuyère. Cette approche offre

surtout un avantage économique qui devrait permettre de calculer une phase thermique transitoire de plusieurs secondes, voire un calcul couplé fluide/structure-thermique sur la durée totale d'un tir dans les années à venir. Les méthodes LES pourraient apporter des éléments supplémentaires lorsque l'écoulement présente des poches de décollement. Ce genre de phénomènes physiques devrait cependant rester marginal, dans la mesure où le gradient de pression a plutôt un effet stabilisant.

Pour la modélisation des écoulements de proche-paroi, l'option actuellement retenue des lois de paroi semble convenir aux exigences de l'écoulement. Bien sûr, un travail conséquent est encore nécessaire avant d'aboutir à un modèle de paroi global, mais chacun des effets physiques importants à prendre en compte semble intégrable avec cette approche. Le mystère reste néanmoins entier en ce qui concerne la précision finale du modèle complet. Seules des études *a posteriori* pourront répondre à cette interrogation.

En parallèle de l'amélioration des lois de paroi, il serait également intéressant d'explorer les approches type TBLE (*Thin Boundary Layer Equations*, voir la section 1.3.2.b)). Le coût de développement d'une telle méthode est en effet tout à fait compétitif comparativement à l'effort nécessaire pour développer des lois de paroi en situations complexes. De plus, selon les premières études employant cette technique, le surcoût d'utilisation par rapport aux lois de paroi est restreint (de 10% à 20%). L'ablation des parois pourrait très bien être traitée avec cette approche, tout comme les transferts radiatifs et la rugosité des parois car les propositions précédemment énoncées à ce sujet restent compatibles. Concernant l'influence du nombre de Mach, il n'existe pas encore d'études disponibles dans la littérature utilisant une approche zonale de ce style, mais tout laisse penser que cette approche devrait bien se comporter pour tout nombre de Mach (pour peu que le terme d'échauffement visqueux soit intégré dans les équations à résoudre). Enfin, l'intérêt des méthodes TBLE résidant dans la prise en compte intrinsèque (mais partielle) du gradient de pression, on peut potentiellement espérer obtenir une prédiction naturelle de la relaminarisation de l'écoulement. L'approche TBLE mérite donc d'être étudiée.

Bibliographie

- [1] R. Acharya and K. K. Kuo. Effect of chamber pressure and propellant composition on erosion rate of graphite rocket nozzle. *J. Propulsion and Power*, 23(6) :1242–1254, 2007. Cité p. 163
- [2] R. J. Adrian. Hairpin vortex organization in wall turbulence. *Phys. Fluids*, 19(4) :041301, April 2007. Cité p. 40
- [3] R. J. Adrian, C. D. Meinhart, and C. D. Tomkins. Vortex organization in the outer region of the turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 422 :1–54, 2000. Cité p. 35, 39, 40
- [4] Air Force Rocket Propulsion Laboratory. Aerotherm graphite surface kinetics computer program, volume 1 : program description and ample problems. *Aerotherm Report*, UM-72-25, January 1972. Cité p. 66
- [5] Air Force Rocket Propulsion Laboratory. Aerotherm graphite surface kinetics computer program, volume 2 : Fortran variables, flow charts, and program listings. *Aerotherm Report*, UM-72-25, January 1972. Cité p. 66
- [6] Air Force Rocket Propulsion Laboratory. Aerotherm graphite surface kinetics computer program (GASKET2). *Aerotherm Report*, TR-76-13, December 1976. Cité p. 66
- [7] J. Amaya, O. Cabrit, D. Poitou, B. Cuenot, and M. El Hafi. Unsteady coupling of Navier-Stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow. *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 111(2) :295–301, January 2010. Cité p. 78, 122, 166

- [8] P. S. Andersen, W. M. Kays, and R. J. Moffat. Experimental results for the transpired turbulent boundary layer in an adverse pressure gradient. *J. Fluid Mech.*, 69(2) :353–375, 1975. Cité p. 34, 50, 103, 104
- [9] L. Artal. *Modélisation des flux de chaleur stationnaires pour un mélange multi-espèces avec transfert de masse à la paroi*. PhD thesis, Université Montpellier 2, 2006. Cité p. 14, 17, 49, 71, 201
- [10] Y. Aspa. *Modélisation de l'ablation des composites C/C dans les tuyères*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006. Cité p. 203
- [11] B. Aupoix. Couches limites bi-dimensionnelles compressibles. Descriptif et mode d'emploi du code CLIC2. Rapport final RF1/5620.02-1/5620.05, ONERA, DMAE, 1999. Cité p. 67
- [12] L. H. Back, R. F. Cuffel, and P. F. Massier. Laminarization of a turbulent boundary layer in nozzle flow. *AIAA J.*, 7(4) :730–733, April 1969. Cité p. 45, 123, 126
- [13] P. Baiocco and P. Bellomi. A coupled thermo-ablative and fluid dynamic analysis for numerical application to solid propellant rockets. *AIAA Paper 1996-1811*, June 1996. Cité p. 163, 169
- [14] E. Balaras, C. Benocci, and U. Piomelli. Two-layer approximate boundary conditions for large-eddy simulations. *AIAA J.*, 34(6) :1111–1119, June 1996. Cité p. 60, 65
- [15] G. K. Batchelor. *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, 1967. Cité p. 18
- [16] Y. Benarafa, O. Cioni, F. Ducros, and P. Sagaut. RANS/LES coupling for unsteady turbulent flow simulation at high Reynolds number on coarse meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195(23-24) :2939–2960, 2006. Cité p. 60, 61, 63, 65
- [17] Y. Benarafa, O. Cioni, F. Ducros, and P. Sagaut. Temperature wall modelling for large-eddy simulation in a heated turbulent plane channel flow. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 50(21-22) :4360–4370, 2007. Cité p. 60, 61, 64, 66
- [18] F. P. Bertolotti, T. Herbert, and P. R. Spalart. Linear and nonlinear stability of the Blasius boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 242 :441–474, 1992. Cité p. 203
- [19] D. Bianchi. *Modeling of ablation phenomena in space applications*. PhD thesis, Università degli Studi di Roma "La Sapienza", 2007. Cité p. 67
- [20] D. Bianchi, F. Nasuti, and E. Martelli. Coupled analysis of flow and surface ablation in carbon-carbon rocket nozzles. *J. Spacecraft and Rockets*, 46(3) :492–500, 2009. Cité p. 163

-
- [21] H. Blasius. Boundary layers in fluids with small friction. *Z. Math. Phys.*, 56 :1–37, 1908. Cité p. 34, 73
- [22] D. Bradley, G. Dixon-Lewis, S. El-Din Habik, and E. M. J. Mushi. The oxidation of graphite powder in flame reaction zones. In *20th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 931–940, Pittsburg, 1984. The Combustion Institute. Cité p. 171
- [23] P. Bradshaw. Compressible turbulent shear layers. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 9 :33–54, 1977. Cité p. 49, 73
- [24] M. Breuer, B. Jaffrézic, and K. Arora. Hybrid LES-RANS technique based on a one-equation near-wall model. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 22(3-4) :157–187, 2008. Cité p. 63, 66, 202
- [25] M. Breuer, B. Kniazev, and M. Abel. Development of wall models for LES of separated flows using statistical evaluations. *Comput. Fluids*, 36(5) :817–837, 2007. Cité p. 66, 202
- [26] M. Breuer, N. Peller, C. Rapp, and M. Manhart. Flow over periodic hills – Numerical and experimental study in a wide range of Reynolds numbers. *Comput. Fluids*, 38(2) :433–457, February 2009. Cité p. 45, 49, 202
- [27] G. Brilliant, F. Bataille, and F. Ducros. Large-eddy simulation of a turbulent boundary layer with blowing. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 17(5-6) :433–443, 2004. Cité p. 49
- [28] G. Brilliant, S. Husson, and F. Bataille. Experimental study of the blowing impact on a hot turbulent boundary layer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 51(7-8) :1996–2005, 2008. Cité p. 49
- [29] C. Brun, M. P. Boiarciuc, M. Haberkorn, and P. Comte. Large eddy simulation of compressible channel flow. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 22(3-4) :189–212, 2008. Cité p. 49, 73
- [30] V. A. Burakov and S. F. Sandu. Mathematical modeling of the dynamics of slagging and thermochemical destruction of carbon composite thermal protective materials in high-temperature two-phase flow. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 33(4) :472–481, 1997. Cité p. 164
- [31] M. H. Buschmann and M. Gad-el Hak. Debate concerning the mean-velocity profile of a turbulent boundary layer. *AIAA J.*, 41(4) :565–572, April 2003. Cité p. 65, 75, 103
- [32] M. H. Buschmann and M. Gad-el Hak. Generalized logarithmic law and its consequences. *AIAA J.*, 41(1) :40–48, January 2003. Cité p. 65, 75
- [33] M. H. Buschmann and M. Gad-el Hak. Structure of the canonical turbulent wall-bounded flow. *AIAA J.*, 44(11) :2500–2503, November 2006. Cité p. 65, 75
-

- [34] W. Cabot and P. Moin. Approximate wall boundary conditions in the large-eddy simulation of high Reynolds number flow. *Flow, Turb. and Combustion*, 63 :269–291, 1999. Cité p. 60, 61, 65
- [35] O. Cabrit and F. Nicoud. Direct simulations for wall modeling of multicomponent reacting compressible turbulent flows. *Phys. Fluids*, 21(5) :055108, May 2009. Cité p. 164, 165, 166, 168, 173, 174, 175, 187, 192
- [36] T. Cai and X. Hou. Simple method for numerical simulation of temperature response of the solid rocket nozzle. *J. Thermophysics*, 4 :42–46, January 1990. Cité p. 163
- [37] R. B. Cal and L. Castillo. Similarity analysis for transpired turbulent boundary layers subjected to external pressure gradients. *AIAA J.*, 43(9) :1913–1922, September 2005. Cité p. 67
- [38] J. Carlier and M. Stanislas. Experimental study of eddy structures in a turbulent boundary layer using particle image velocimetry. *J. Fluid Mech.*, 535 :143–188, 2005. Cité p. 35, 40
- [39] CERFACS. *The AVBP Handbook*, 2008. Cité p. 34
- [40] P. Chakraborty, S. Balachandar, and R. J. Adrian. On the relationship between local vortex identification schemes. *J. Fluid Mech.*, 535 :189–214, 2005. Cité p. 37
- [41] D. R. Chapman. Computational aerodynamics development and outlook. *AIAA J.*, 17(12) :1293–1313, December 1979. Cité p. 55
- [42] P. Chassaing. *Mécanique des fluides, Éléments d'un premier parcours*. Cépaduès-Éditions, 2000. Cité p. 18
- [43] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides*. Cépaduès-Éditions, 2000. Cité p. 25, 34
- [44] H. K. Chelliah, A. Makino, I. Kato, N. Araki, and C. K. Law. Modeling of graphite oxidation in a stagnation-point flow field using detailed homogeneous and semiglobal heterogeneous mechanisms with comparisons to experiments. *Combust. Flame*, 104(4) :469–480, March 1996. Cité p. 158, 171
- [45] Y. K. Chen and F. S. Milos. Navier-Stokes solutions with finite rate ablation for planetary mission earth reentries. *J. Spacecraft and Rockets*, 42(6) :961–970, November-December 2005. Cité p. 163
- [46] R. K. Cheng and T. T. Ng. Some aspects of strongly heated turbulent boundary layer flow. *Phys. Fluids*, 25(8) :1333–1341, August 1982. Cité p. 44, 49, 74

-
- [47] M. S. Chong, J. Soria, A. E. Perry, J. Chacin, B. J. Cantwell, and Y. Na. Turbulence structures of wall-bounded shear flows using DNS data. *J. Fluid Mech.*, 357 :225–247, 1998. Cité p. 40
- [48] F. H. Clauser. Turbulent boundary layers in adverse pressure gradients. *J. Aero. Sci.*, 21 :91–108, 1954. Cité p. 42, 123
- [49] F. H. Clauser. The turbulent boundary layer. *Advances Appl. Mech.*, 4 :1–51, 1956. Cité p. 34, 65, 73
- [50] G. N. Coleman, Kim J., and R. D. Moser. A numerical study of turbulent supersonic isothermal-wall channel flow. *J. Fluid Mech.*, 305 :159–183, 1995. Cité p. 49, 73, 74, 85
- [51] D. Coles. The law of the wake in the turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 1 :191–226, 1956. Cité p. 65
- [52] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2) :338–371, 2000. Cité p. 32, 87, 175
- [53] J. Cousteix. *Turbulence et Couche Limite*. Cépaduès-Éditions, 1989. Cité p. 34
- [54] T. J. Craft, S. E. Gant, A. V. Gerasimov, H. Iacovides, and B. E. Launder. Development and application of wall-function treatments for turbulent forced and mixed convection flows. *Fluid Dynamics Research*, 38(2-3) :127–144, 2006. Cité p. 67, 76, 119, 129
- [55] T. J. Craft, S. E. Gant, H. Iacovides, and B. E. Launder. A new wall function strategy for complex turbulent flows. *Numer. Heat Transfer*, 45(4) :301–318, 2004. Cité p. 76
- [56] T. J. Craft, A. V. Gerasimov, H. Iacovides, and B. E. Launder. Progress in the generalization of wall-function treatments. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 23(2) :148–160, 2002. Cité p. 62, 66, 75, 76, 119, 129
- [57] D. A. Cvelbar. Nozzle recession study. In *the 1981 JANNAF Propulsion Meeting, New Orleans, LA*, pages 51–68. CPIA Publication 342, May 1981. Cité p. 167
- [58] F. Dabireau. *Étude des transferts de chaleur aux parois dans les moteurs-fusées*. PhD thesis, INP Toulouse, 2002. Cité p. 66, 67
- [59] L. D. Dailey, N. Meng, and R. H. Pletcher. Large eddy simulation of constant heat flux turbulent channel flow with property variations : quasi-developed model and mean flow results. *J. Heat Trans.*, 125(1) :27–38, February 2003. Cité p. 44, 66, 73, 76
- [60] L. Davidson and S. H. Peng. Hybrid LES-RANS modelling : a one-equation SGS model combined with a k - ω model for predicting recirculating flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 43(9) :1003–1018, 2003. Cité p. 63, 66, 202
-

- [61] P. A. Davidson, T. B. Nickels, and P. Å. Krogstad. The logarithmic structure function law in wall-layer turbulence. *J. Fluid Mech.*, 550 :51–60, 2006. Cité p. 75
- [62] J. W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, 41(2) :453–480, 1970. Cité p. 59, 65
- [63] J. C. del Álamo and J. Jiménez. Spectra of the very large anisotropic scales in turbulent channels. *Phys. Fluids*, 15(6) :L41–L44, 2003. Cité p. 40, 104
- [64] J. C. del Álamo, J. Jiménez, P. Zandonade, and R. D. Moser. Scaling of the energy spectra of turbulent channels. *J. Fluid Mech.*, 500 :135–144, 2004. Cité p. 40, 104
- [65] G. Desoutter. *Etude numérique de la propagation d'une flamme sous l'influence d'un film liquide de carburant sur la paroi*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. Cité p. 67
- [66] G. Desoutter, C. Habchi, B. Cuenot, and T. Poinsot. DNS and modeling of the turbulent boundary layer over an evaporating liquid film. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 52(25-26) :6028–6041, December 2009. Cité p. 67
- [67] A. Devesa. *Modélisation de paroi pour la simulation d'écoulements instationnaires non-isothermes*. PhD thesis, Université de Montpellier II, 2006. Cité p. 17, 62, 64, 66
- [68] L. Duan and M. P. Martín. Procedure to validate direct numerical simulations of wall-bounded turbulence including finite-rate reactions. *AIAA J.*, 47(1) :244–251, January 2009. Cité p. 153
- [69] G. Duffa. Ablation. Technical report, CEA/CESTA, 1996. Cité p. 202
- [70] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*. Lecture Notes in Physics, New Series Monographs, m 24. Springer-Verlag, Heidelberg, 1994. Cité p. 81, 85, 95, 100, 168, 190
- [71] A. Ern and V. Giovangigli. Fast and accurate multicomponent transport property evaluation. *J. Comput. Phys.*, 120(1) :105–116, August 1995. Cité p. 81, 85, 95, 100, 158, 160, 168, 190
- [72] A. Ern and V. Giovangigli. *EGLIB : a general-purpose FORTRAN library for multicomponent transport property evaluation*. CERMICS and CMAP, 2001. Cité p. 33
- [73] B. Evans, P. J. Ferrara, J. D. Moore, and E. Boyd. Evaluation of nozzle erosion characteristics utilizing a rocket motor simulator. *AIAA Paper 2006-5245*, 42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 9-22 July 2006. Cité p. 163
- [74] R. E. Falco. Coherent motions in the outer region of turbulent boundary layer. *Phys. Fluids*, 20(10) :124, October 1977. Cité p. 35, 40

- [75] H. Fernholz and P. Finley. A critical compilation of compressible turbulent boundary layer data. *AGARD-AG*, 223, 1977. Cité p. 73
- [76] H. Fernholz and P. Finley. A critical commentary on mean flow data for two-dimensional compressible turbulent boundary layers. *AGARD-AG*, 253, 1980. Cité p. 74
- [77] J. Fröhlich, C. P. Mellen, W. Rodi, L. Temmerman, and M. A. Leschziner. Highly resolved large-eddy simulation of separated flow in a channel with streamwise periodic constrictions. *J. Fluid Mech.*, 526 :19–66, 2005. Cité p. 45, 49, 202
- [78] R. L. Geisler. The prediction of graphite rocket nozzle recession rates. In *the 1981 JANNAF Propulsion Meeting, New Orleans, LA*, volume 5, pages 173–196. CPIA Publication 340, May 1981. Cité p. 163, 167
- [79] M. Germano. Properties of the hybrid RANS/LES filter. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 17(4) :225–231, August 2004. Cité p. 63
- [80] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Birkhäuser Boston, 1999. Cité p. 18, 19, 22, 23, 80, 86, 156, 167, 168
- [81] E. C. Golovina. The gasification of carbon by carbon dioxide at high temperatures and pressures. *Carbon*, 18(3) :197–201, 1980. Cité p. 171
- [82] P. Goulpié, B. G. B. Klingmann, and A. Bottaro. Görtler vortices in boundary layers with streamwise pressure gradient : linear theory. *Phys. Fluids*, 8(2) :451–459, February 1996. Cité p. 47
- [83] V. R. Gowariker. Mechanical and chemical contributions to the erosion rates of graphite throats in rocket motor nozzles. *J. Spacecraft and Rockets*, 3(10) :1490–1494, 1966. Cité p. 171
- [84] G. Grötzbach. Direct numerical and large eddy simulation of turbulent channel flows. *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, 6 :1337, 1987. Cité p. 59, 65
- [85] S. E. Guarini, R. D. Moser, K. Shariff, and A. Wray. Direct numerical simulation of a supersonic turbulent boundary layer at Mach 2.5. *J. Fluid Mech.*, 414 :1–33, 2000. Cité p. 49
- [86] S. Hahn, J. Je, and H. Choi. Direct numerical simulation of turbulent channel flow with permeable walls. *J. Fluid Mech.*, 450 :259–285, 2002. Cité p. 46, 49, 164
- [87] E. A. Hamza. Suction and injection effects on a similar flow between parallel plates. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 32(4) :656–663, 1999. Cité p. 153

- [88] Z. Han and R. D. Reitz. A temperature wall function formulation for variable-density turbulent flows with application to engine convective heat transfer modeling. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 40(3) :613–625, 1997. Cité p. 66, 75, 76
- [89] S. Herpin, C. Y. Wong, M. Stanislas, and J. Soria. Stereoscopic PIV measurements of a turbulent boundary layer with a large spatial dynamic range. *Exp. Fluids*, 45(4) :745–763, October 2008. Cité p. 35, 40
- [90] S. Hickel and N. A. Adams. Implicit LES applied to zero-pressure-gradient and adverse-pressure-gradient boundary-layer turbulence. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 29(3) :626–639, June 2008. Cité p. 45, 49
- [91] C. Hirsch. *Numerical computation of internal and external flows*. John Wiley & Sons, Ltd, 2007. Cité p. 31
- [92] J.O. Hirschfelder, F. Curtiss, and R.B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, 1964. Cité p. 22, 23, 80, 156, 167
- [93] A. Honkan and Y. Andreopoulos. Vorticity, strain-rate and dissipation characteristics in the near-wall region of turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 350 :29–96, 1997. Cité p. 40
- [94] T. Houra and Y. Nagano. Effects of adverse pressure gradient on heat transfer mechanism in thermal boundary layer. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 27 :967–976, 2006. Cité p. 49, 50, 75, 76, 123
- [95] S. Hoyas and J. Jiménez. Scaling the velocity fluctuations in turbulent channel up to $Re_\tau = 2003$. *Phys. Fluids*, 18(011702), 2006. Cité p. 37, 40, 43, 48, 74, 83, 103, 104, 126, 134, 140, 141, 145, 164, 174
- [96] P. G. Huang and P. Bradshaw. Law of the wall for turbulent flows in pressure gradients. *AIAA J.*, 33(4) :624–632, April 1995. Cité p. 66, 75, 76
- [97] P. G. Huang, P. Bradshaw, and T. J. Coakley. Skin friction and velocity profile family for compressible turbulent boundary layers. *AIAA J.*, 31(9) :1600–1604, September 1993. Cité p. 60, 66, 74, 105, 201, 202
- [98] P. G. Huang and G. N. Coleman. Van driest transformation and compressible wall-bounded flows. *AIAA J.*, 32(10) :2110–2113, 1994. Cité p. 60, 66, 74, 76, 105, 201, 202
- [99] P. G. Huang, G. N. Coleman, and P. Bradshaw. Compressible turbulent channel flows : DNS results and modelling. *J. Fluid Mech.*, 305 :185–218, 1995. Cité p. 49, 73, 74, 98, 164
- [100] I. E. Idel'cik. *Memento des pertes de charge*. Editions Eyrolles, Direction des études et recherches d'électricité de France, 1969. Cité p. 65

-
- [101] T. Indinger and M. H. Buschmann. Mean-velocity profile of turbulent boundary layers approaching separation. *AIAA J.*, 44(11) :2465–2474, November 2006. Cité p. 45, 49, 123
- [102] J. Jiménez. Turbulent flows over rough walls. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 36 :173–196, January 2004. Cité p. 47, 48, 49
- [103] J. Jiménez, S. Hoyas, and Y. Simens, M. P. ans Mizuno. Comparison of turbulent boundary layers and channels from direct numerical simulation. In *Proceedings of the 6th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, volume 1, pages 289–294, Seoul, Korea, June 22-24 2009. Cité p. 39, 40
- [104] J. Jiménez, G. Kawahara, M. P. Simens, M. Nagata, and M. Shiba. Characterization of near-wall turbulence in terms of equilibrium and ”bursting” solutions. *Phys. Fluids*, 17(015105) :1–16, 2005. Cité p. 40
- [105] J. Jiménez and P. Moin. The minimal flow unit in near-wall turbulence. *J. Fluid Mech.*, 225 :213–240, 1991. Cité p. 83, 174
- [106] J. Jiménez and R. D. Moser. What are we learning from simulating wall turbulence ? *Phil. Trans. R. Soc. A*, 365 :715–732, 2007. Cité p. 40, 74
- [107] D. Joseph. *Modélisation des transferts radiatifs en combustion par méthode aux ordonnées discrètes sur des maillages non structurés tridimensionnels*. PhD thesis, INP Toulouse, 2004. Cité p. 33
- [108] B. A. Kader. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 24(9) :1541–1544, 1981. Cité p. 59, 66, 73, 76, 114, 115, 116, 132
- [109] B. A. Kader. Heat and mass transfer in pressure-gradient boundary layers. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 34(11) :2837–2857, November 1991. Cité p. 67
- [110] G. Kalitzin, G. Medic, and J. A. Templeton. Wall modeling for LES of high Reynolds number channel flows : what turbulence information is retained ? *Comput. Fluids*, 37(7) :809–815, August 2008. Cité p. 60, 65
- [111] H. Kawamura, H. Abe, and Y. Matsuo. DNS of turbulent heat transfer in channel flow with respect to Reynolds and Prandtl number effects. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 20 :196–207, 1999. Cité p. 45, 49, 134, 139, 140, 141, 146, 164
- [112] H. Kawamura, K. Ohsaka, H. Abe, and K. Yamamoto. DNS of turbulent heat transfer in channel flow with low to medium-high Prandtl number fluid. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 19 :482–491, 1998. Cité p. 45, 49, 50, 134, 139, 140, 141, 146
- [113] K.C. Kays. Turbulent Prandtl number. Where are we ? *J. Heat Trans.*, 116 :284–295, May 1994. Cité p. 109
-

- [114] W.M. Kays, M.E. Crawford, and B. Weigand. *Convective Heat and Mass Transfer*. McGraw-Hill, 2004. Cité p. 51, 53, 54, 58, 65, 104, 114, 202
- [115] D. W. Kearney, W. M. Kays, and R. J. Moffat. Heat transfer to a strongly accelerated turbulent boundary layer : some experimental results, including transpiration. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16(6) :1289–1305, 1973. Cité p. 45, 49, 123
- [116] R. J. Kee, J. A. Miller, and T. H. Jefferson. Chemkin : A general-purpose, problem-independent, transportable, fortran chemical-kinetics code package. Technical Report SAND80-8003, Sandia National Laboratories, 1980. Cité p. 168
- [117] R. J. Kee, F. M. Rupley, and J. A. Miller. Chemkin-II : A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Technical Report SAND89-8009B, Sandia National Laboratories, 1989. Cité p. 168
- [118] E. R. Keener and E. J. Hopkins. Van Driest generalization applied to turbulent skin friction and velocity profiles measured on the wall of a Mach 7.4 wind tunnel. *AIAA J.*, 11(12) :1784–1785, December 1973. Cité p. 66, 74, 105
- [119] R. M. Kendall, R. A. Rindal, and E. P. Bartlett. A multicomponent boundary layer chemically coupled to an ablating surface. *AIAA J.*, 5(6) :1063–1071, 1967. Cité p. 163, 169
- [120] S. T. Keswani, E. Andiroglu, J. D. Campbell, and K. K. Kuo. Recession behavior of graphitic nozzles in simulated rocket motors. *AIAA Paper 1983-1317*, 1983. Cité p. 167, 169
- [121] S. T. Keswani and K. K. Kuo. An aerothermochemical model of carbon-carbon composite nozzle recession. *AIAA Paper 83-910*, 1983. Cité p. 163, 169
- [122] S. T. Keswani and K. K. Kuo. Validation of an aerothermochemical model for graphite nozzle recession and heat-transfer process. *Combust. and Tech.*, 47(3) :177–192, 1986. Cité p. 172
- [123] J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 177 :133–166, 1987. Cité p. 37, 40, 74, 83, 164, 173
- [124] K. Klager. The interaction of the efflux of solid propellants with nozzle materials. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2(3) :55–63, January 1977. Cité p. 164, 167, 171
- [125] S. J. Kline, W. C. Reynolds, F. A. Schraub, and P. W. Runstadler. The structure of turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 30(4) :741–773, 1967. Cité p. 35, 40
- [126] J. C. Y. Koh and J. P. Hartnett. Skin friction and heat transfer for incompressible laminar flow over porous wedges with suction and variable wall temperature. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 2(3) :185–198, April 1961. Cité p. 153

-
- [127] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30 :299–303, 1941. Cité p. 26
- [128] H. Kong, H. Choi, and J. S. Lee. Direct numerical simulation of turbulent thermal boundary layers. *Phys. Fluids*, 12(10) :2555–2568, October 2000. Cité p. 37, 40
- [129] J. H. Koo, D. W. H. Ho, and O. A. Ezekoye. A review of numerical and experimental characterization of thermal protection materials - part I. numerical modeling. *AIAA Paper 2006-4936*, 42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 9-22 July 2006. Cité p. 163
- [130] A. G. Kravchenko and P. Moin. On the effect of numerical errors in large eddy simulations of turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, 131(2) :310–322, March 1997. Cité p. 30
- [131] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2nd edition, 2005. Cité p. 24, 77, 86, 165
- [132] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. Cité p. 31, 34
- [133] N. Lamarque, M. Porta, F. Nicoud, and T. Poinsot. On the stability and dissipation of wall boundary conditions for compressible flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, in press, 2009. Cité p. 32
- [134] B. E. Launder and D. B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 3(2) :269–289, 1974. Cité p. 117
- [135] P. D. Lax and B. Wendroff. Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl. Math.*, 13 :217–237, 1960. Cité p. 31
- [136] P. D. Lax and B. Wendroff. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Commun. Pure Appl. Math.*, 17 :381–398, 1964. Cité p. 31
- [137] M. Lesieur. *Turbulence in fluids*. Springer, Dordrecht, The Netherlands, 4th edition edition, 2008. Cité p. 18, 34
- [138] M. Lesieur, O. Métais, and P. Comte. *Large-eddy simulations of turbulence*. Cambridge University Press, 2005. Cité p. 29
- [139] P. A. Libby and T. R. Blake. Theoretical study of burning carbon particles. *Combust. Flame*, 36 :139–169, 1979. Cité p. 153, 171, 172
- [140] Z. C. Liu, R. J. Landreth, R. J. Adrian, and T. J. Hanratty. High resolution measurement of turbulent structure in a channel with particle image velocimetry. *Exp. Fluids*, 10(6) :301–312, March 1991. Cité p. 35, 40
-

- [141] L. J. Lu and C. R. Smith. Image processing of hydrogen bubble flow visualization for determination of turbulence statistics and bursting characteristics. *Exp. Fluids*, 3(6) :349–356, November 1985. Cité p. 35, 40
- [142] T. S. Lund, X. Wu, and K. D. Squires. Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations. *J. Comput. Phys.*, 140(2) :233–258, 1998. Cité p. 203
- [143] M. Manhart, N. Peller, and C. Brun. Near-wall scaling for turbulent boundary layers with adverse pressure gradient. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 22(3-4) :243–260, May 2008. Cité p. 66, 202
- [144] M. P. Martín. Direct numerical simulation of hypersonic turbulent boundary layers. Part 1. Initialization and comparison with experiments. *J. Fluid Mech.*, 570 :347–364, 2007. Cité p. 49
- [145] M. P. Martín and G. V. Candler. DNS of a mach 4 boundary layer with chemical reactions. *AIAA Paper 2000-0399*, January 2000. Cité p. 49, 50, 74
- [146] M. P. Martín and G. V. Candler. Temperature-fluctuation scaling in reacting boundary layers. In *Annual Research Briefs*, pages 151–162. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2001. Cité p. 49, 50, 74
- [147] I. Marusic. On the role of large-scale structures in wall turbulence. *Phys. Fluids*, 13(3) :735–743, 2001. Cité p. 39, 40
- [148] I. Marusic, G. J. Kunkel, and F. Porté-Agel. Experimental study of wall boundary conditions for large-eddy simulation. *J. Fluid Mech.*, 446 :309–320, 2001. Cité p. 65
- [149] S. Mendez. *Simulation numérique et modélisation de l'écoulement autour des parois multiperforées*. PhD thesis, Université de Montpellier II, 2007. Cité p. 17
- [150] S. Mendez and F. Nicoud. Adiabatic homogeneous model for flow around a multiperforated plate. *AIAA J.*, 46(10) :2623–2633, October 2008. Cité p. 66
- [151] S. Mendez and F. Nicoud. Large-eddy simulation of a bi-periodic turbulent flow with effusion. *J. Fluid Mech.*, 598 :27–65, 2008. Cité p. 31, 49, 87, 175
- [152] B. Mohammadi and G. Puigt. Wall functions in computational fluid mechanics. *Comput. Fluids*, 35(10) :1108–1115, 2006. Cité p. 60, 65, 75
- [153] P. Moin and J. Kim. Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.*, 118 :341–377, 1982. Cité p. 40, 73
- [154] P. Moin and K. Mahesh. Direct numerical simulation : a tool in turbulence research. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 :539–578, 1998. Cité p. 73

-
- [155] D. Monfort, S. Benhamadouche, and P. Sagaut. Meshless approach for wall treatment in Large-Eddy Simulation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 199(13-16) :881–889, February 2010. Cité p. 62, 66, 202
- [156] P. A. Monkewitz, K. A. Chauhan, and H. M. Nagib. Self-consistent high-Reynolds-number asymptotics for zero-pressure-gradient turbulent boundary layers. *Phys. Fluids*, 19(11) :115101, November 2007. Cité p. 65
- [157] J. P. Monty and M. S. Chong. Turbulent channel flow : comparison of streamwise velocity data from experiments and direct numerical simulation. *J. Fluid Mech.*, 633 :461–474, 2009. Cité p. 35, 39, 40, 164
- [158] Y. Morinishi, S. Tamano, and K. Nakabayashi. Direct numerical simulation of compressible turbulent channel flow between adiabatic and isothermal walls. *J. Fluid Mech.*, 502 :273–308, 2004. Cité p. 49, 73, 74, 164
- [159] M. V. Morkovin. Effects of compressibility on turbulent flows. In *Int. Symp. on the Mechanics of Turbulence*, pages 367–380. Gordon and Breach science publishers, New York, 1964. Cité p. 74
- [160] J. F. Morrison, B. J. McKeon, W. Jiang, and A. J. Smits. Scaling of the streamwise velocity component in turbulent pipe flow. *J. Fluid Mech.*, 508 :99–131, 2004. Cité p. 35, 40
- [161] R.D. Moser, J Kim, and N.N. Mansour. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$. *Phys. Fluids*, 11(4) :943–945, 1999. Cité p. 37, 40, 42, 43, 74, 83
- [162] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.*, 202(2) :710–736, 2005. Cité p. 87, 175
- [163] Y. Na and P. Moin. Direct numerical simulation of a separated turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 374 :379–405, 1998. Cité p. 45, 49, 123
- [164] T.B. Nickels. Inner scaling for wall-bounded flows subject to large pressure gradients. *J. Fluid Mech.*, 521 :217–239, 2004. Cité p. 66, 75, 76, 103, 123, 125
- [165] F. Nicoud. *Prévision des transferts convectifs sur les protections thermiques d'un propulseur à propergol solide*. PhD thesis, INP Toulouse, 1993. Cité p. 14, 60
- [166] F. Nicoud. Numerical study of a channel flow with variable properties. In *Annual Research Briefs*, pages 289–310. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998. Cité p. 44, 49, 74, 164
- [167] F. Nicoud and P. Bradshaw. A velocity transformation for heat and mass transfer. *Phys. Fluids*, 12(1) :237–238, January 2000. Cité p. 75, 76
-

- [168] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turb. and Combustion*, 62 :183–200, 1999. Cité p. 57, 87
- [169] F. Nicoud, J. C. Traineau, and M. Prévost. Evolution of heat flux with mass flow rate in a subscale setup for the Ariane 5 solide rocket booster. In *2nd International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Florence (Italy), May 31 - June 2*. ONERA, 1993. Cité p. 79
- [170] N. V. Nikitin, F. Nicoud, B. Wasistho, K. D. Squires, and P. R. Spalart. An approach to wall modeling in large-eddy simulations. *Phys. Fluids*, 12(7) :1629–1632, July 2000. Cité p. 63, 65
- [171] J. Nikuradse. Law of flow in rough pipes. Technical report, National Advisory Commission for Aeronautics, Washington D. C., 1933. Cité p. 47
- [172] J. Nordström, N. Nordin, and D. Henningson. The fringe region technique and the fourier method used in the direct numerical simulation of spatially evolving viscous flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(4) :1365–1393, 1999. Cité p. 203
- [173] J.M. Österlund, A. V. Johansson, H. M. Nagib, and M. H. Hites. A note on the overlap region in turbulent boundary layers. *Phys. Fluids*, 12(1) :1–4, January 2000. Cité p. 65, 75, 103, 104, 105, 106, 113, 117
- [174] S. V. Patankar and D. B. Spalding. *Heat and mass transfer in boundary layers*. Morgan-Grampian, London, 1967. Cité p. 65, 73
- [175] D. Y. Peng and D. B. Robinson. A new two-constant equation of state. *Ind. Eng. Chem., Fundam.*, 15(1) :59–64, 1976. Cité p. 19, 79
- [176] A. E. Perry and M. S. Chong. On the mechanism of wall turbulence. *J. Fluid Mech.*, 119 :173–217, 1982. Cité p. 40
- [177] A. E. Perry, K. L. Lim, and S. M. Henbest. An experimental study of the turbulence structure in smooth- and rough-wall boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 177 :437–466, 1987. Cité p. 49
- [178] A. E. Perry, W. H. Schofield, and P. N. Joubert. Rough wall turbulent boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 37(2) :383–413, 1969. Cité p. 49
- [179] B. S. Petukhov. Heat transfer and friction in turbulent pipe flow with variable physical properties. *Advances in Heat Transfer*, 6 :503–564, 1970. Cité p. 52, 66
- [180] U. Piomelli. Wall-layer models for large-eddy simulations. *Progress in Aerospace Sciences*, 44(6) :437–446, 2008. Cité p. 55, 57, 62, 63, 64, 65, 139

-
- [181] U. Piomelli and E. Balaras. Wall-layer models for large-eddy simulations. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 34 :349–374, 2002. Cité p. 57, 65
- [182] U. Piomelli, J. Ferziger, P. Moin, and J. Kim. New approximate boundary conditions for large eddy simulations of wall-bounded flows. *Phys. Fluids A*, 1(6) :1061–1068, June 1989. Cité p. 59, 65, 66
- [183] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, 2nd edition, 2005. Cité p. 18, 21, 77, 78, 165, 168
- [184] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, and J. P. O’Connell. *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill, 5th edition, 2001. Cité p. 79
- [185] S. B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000. Cité p. 25, 34, 41
- [186] L. Prandtl. Über Flüssigkeitsbewegung bei sehr kleiner Reibung. In Teubner, editor, *Verhandlungen des dritten internationalen Mathematiker-Kongresses*, pages 484–491, Leipzig, Germany, 1905. Cité p. 34, 73
- [187] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes, the art of scientific computing*. Press Syndicate of the University of Cambridge, New York, USA, 2nd edition, 1992. Cité p. 133
- [188] G. Puigt. *Modélisation, étude mathématique et numérique des lois de paroi pour les écoulements à grande vitesse sur parois lisses et rugueuses*. PhD thesis, Université de Montpellier II, 2001. Cité p. 66, 202
- [189] M. M. Rai and P. Moin. Direct numerical simulation of transition and turbulence in a spatially evolving boundary layer. *J. Comput. Phys.*, 109(2) :169–192, December 1993. Cité p. 37, 40
- [190] S. Rajagopalan and R. A. Antonia. Some properties of the large structure in a fully developed turbulent duct flow. *Phys. Fluids*, 22(4) :614–622, April 1979. Cité p. 40, 59
- [191] B. Rajamani and J. Kim. Analysis of Germano’s hybrid filter for simulation of turbulent flows. In *Proceedings of the 6th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, volume 3, pages 1045–1050, Seoul, Korea, June 22–24 2009. Cité p. 63
- [192] H. Reichardt. Über die geschwindigkeitsverteilung in einer geradlinigen turbulenten couetteströmung. *Z. Angew. Math. Mech.*, 36 :26–29, 1959. Cité p. 59
- [193] M. Reshotko, D. R. Boldman, and R. C. Elhers. Effects of roughness on heat transfer in conical nozzles. *NASA TM X-52864*, 1970. Cité p. 66
- [194] L. F. Richardson. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 1922. Cité p. 26
-

- [195] M. J. Ringuette, M. Wu, and M. P. Martín. Coherent structures in direct numerical simulation of turbulent boundary layers at Mach 3. *J. Fluid Mech.*, 594 :59–69, 2008. Cité p. 49
- [196] S. K. Robinson. Coherent motions in the turbulent boundary layer. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 23 :601–639, 1991. Cité p. 36, 37, 40
- [197] F. Roman, V. Armenio, and J. Fröhlich. A simple wall-layer model for large eddy simulation with immersed boundary method. *Phys. Fluids*, 21(101701) :1–4, October 2009. Cité p. 55
- [198] R. D. Rosner. Convective diffusion as an intruder in kinetic studies of surface catalyzed reactions. *AIAA J.*, 2(4) :593–610, April 1964. Cité p. 153
- [199] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer, Berlin Heidelberg, 3rd edition, 1998. Cité p. 29
- [200] W. S. Saric. Görtler vortices. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 26 :379–409, January 1994. Cité p. 47
- [201] A. I. Savvatimskiy. Measurements of the melting point of graphite and the properties of liquid carbon (a review for 1963–2003). *Carbon*, 43(6) :1115–1142, May 2005. Cité p. 171
- [202] P. Schlatter, N. A. Adams, and L. Kleiser. A windowing method for periodic inflow/outflow boundary treatment of non-periodic flows. *J. Comput. Phys.*, 206(2) :505–535, 2005. Cité p. 203
- [203] H. Schlichting and K. Gersten. *Boundary Layer Theory*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany, 8th edition, 2000. Cité p. 34, 153
- [204] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans, and K. P. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.*, 570 :17–46, 2007. Cité p. 30, 87, 175
- [205] T. Schmitt. *Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente en régime super-critique*. PhD thesis, INP Toulouse, 2009. Cité p. 19
- [206] T. Schönfeld and M. Rudgyard. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver AVBP. *AIAA J.*, 37(11) :1378–1385, 1999. Cité p. 30
- [207] U Schumann. Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comput. Phys.*, 18 :376–404, August 1975. Cité p. 59, 65
- [208] J.-M. Senoner, M. García, S. Mendez, G. Staffelbach, O. Vermorel, and T. Poinso. Growth of rounding errors and repetitivity of Large-Eddy Simulations. *AIAA J.*, 46(7) :1773–1781, July 2008. Cité p. 136

- [209] T. H. Shih, L. A. Povinelli, and N. S. Liu. Application of generalized wall function for complex turbulent flows. *Journal of Turbulence*, 4(15) :1–16, April 2003. Cité p. 60, 66, 75, 76, 201
- [210] T. H. Shih, L. A. Povinelli, N. S. Liu, and K. H. Chen. Generalized wall function for complex turbulent flows. *NASA TM-2000-209936*, June 2000. Cité p. 66, 201
- [211] T. H. Shih, L. A. Povinelli, N. S. Liu, M. G. Potapczuk, and J. L. Lumley. A generalized wall function. *NASA TM-1999-209398*, July 1999. Cité p. 66, 67, 75, 76, 201
- [212] R. L. Simpson. Characteristics of turbulent boundary layers at low Reynolds numbers with and without transpiration. *J. Fluid Mech.*, 42(4) :769–802, 1970. Cité p. 60, 66, 75, 76, 186
- [213] M. Skote and D.S. Henningson. Analysis of the data base from a DNS of a separating turbulent boundary layer. In *Annual Research Briefs*, pages 225–237. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1999. Cité p. 60, 66, 75, 76, 201
- [214] M. Skote and D.S. Henningson. Direct numerical simulation of a separated turbulent boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 471 :107–136, 2002. Cité p. 45, 60, 66, 75, 76, 123, 125, 201, 203
- [215] C. A. Sleicher and M. W. Rouse. Convenient correlation for heat transfert to constant and variable property fluids in turbulent pipe flow. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 18(5) :677–683, May 1975. Cité p. 44, 54, 66, 73
- [216] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, 91(3) :99–164, March 1963. Cité p. 136
- [217] B. R. Smith. The k-kl turbulence model and wall layer model for compressible flows. *AIAA Paper 1990-1483*, 21st AIAA Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference, 18-20 June 1990. Cité p. 60
- [218] M. W. Smith and A. J. Smits. Visualization of structure of supersonic turbulent boundary layers. *Exp. Fluids*, 18(4) :288–302, February 1995. Cité p. 49
- [219] R. M. C. So, H. S. Zhang, T. B. Gatski, and C. G. Speziale. Logarithmic laws for compressible turbulent boundary layers. *AIAA J.*, 32(11) :2162–2168, November 1994. Cité p. 60, 66, 74, 75, 76, 105
- [220] P. R. Spalart. Numerical study of sink-flow boundary layers. *J. Fluid Mech.*, 172 :307–328, 1986. Cité p. 49, 123, 126
- [221] P. R. Spalart. Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $Re_\theta = 1410$. *J. Fluid Mech.*, 187 :61–98, 1988. Cité p. 37, 40, 203

- [222] P. R. Spalart and S. R. Allmaras. A one-equation turbulence model for aerodynamics flows. *La Recherche Aéronautique*, 1 :5–21, 1994. Cité p. 63
- [223] P. R. Spalart, W.-H. Jou, M. Strelets, and S. R. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach. In *First AFOSR International Conference on DNS/LES*, Columbus, OH, 4-5 August 1997. Greyden Press. Cité p. 63
- [224] P. R. Spalart and H. Watmuff. Experimental and numerical study of a turbulent boundary layer with pressure gradients. *J. Fluid Mech.*, 249 :337–371, 1993. Cité p. 45, 49, 123, 203
- [225] D. B. Spalding. A single formula for the “Law of the Wall”. *J. Appl. Mech.*, pages 455–458, September 1961. Cité p. 65
- [226] E. M. Sparrow, R. Eichhorn, and J. L. Gregg. Combined forced and free convection in a boundary layer flow. *Phys. Fluids*, 2(3) :319–328, 1959. Cité p. 79
- [227] E. F. Spina, A. J. Smits, and S. K. Robinson. The physics of supersonic turbulent boundary layers. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 26 :287–319, 1994. Cité p. 49, 73
- [228] L. C. Squire. A law of the wall for compressible turbulent boundary layers with air injection. *J. Fluid Mech.*, 37(3) :449–456, 1969. Cité p. 66
- [229] M. Stanislas, L. Perret, and J. M. Foucaut. Vortical structures in the turbulent boundary layer : a possible route to a universal representation. *J. Fluid Mech.*, 602 :327–382, 2008. Cité p. 35, 40
- [230] T. N. Stevenson. *A law of the wall for turbulent boundary layers with suction or injection*, volume Rept. 166. The College of Aeronautics, New York, 1963. Cité p. 60, 66
- [231] T. N. Stevenson. Turbulent boundary layers with transpiration. *AIAA J.*, 2(8) :1500–1502, 1964. Cité p. 60, 66
- [232] T. N. Stevenson. Inner region of transpired turbulent boundary layers. *AIAA J.*, 6(3) :553–554, March 1968. Cité p. 60, 66
- [233] C. S. Subramanian and R. A. Antonia. Effect of Reynolds number on a slightly heated turbulent boundary layer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 24(11) :1833–1846, 1981. Cité p. 40, 66, 76
- [234] K. Suga, T. J. Craft, and H. Iacovides. An analytical wall-function for turbulent flows and heat transfer over rough walls. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 27(5) :852–866, 2006. Cité p. 62, 66, 75, 76
- [235] Y. Sumitani and N. Kasagi. Direct numerical simulation of turbulent transport with uniform wall injection and suction. *AIAA J.*, 33(7) :1220–1228, July 1995. Cité p. 46, 49, 164, 186

-
- [236] J Taine and J. P. Petit. *Cours et données de base. Transferts thermiques. Mécanique des fluides anisotherme*. Ed. DUNOD, 1995. Cité p. 53
- [237] M. Teitel and R. A. Antonia. Heat transfer in fully developed turbulent channel flow : comparison between experiment and direct numerical simulations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 36(6) :1701–1706, 1993. Cité p. 49, 74, 164
- [238] L. Temmerman, M. Hadžiabdić, M. A. Leschziner, and K. Hanjalić. A hybrid two-layer URANS-LES approach for large eddy simulation at high Reynolds numbers. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 26(2) :173–190, April 2005. Cité p. 63, 65, 202
- [239] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A first course in turbulence*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, and London, England, 1972. Cité p. 25, 34
- [240] P. Thakre and V. Yang. Chemical erosion of carbon-carbon/graphite nozzles in solid-propellant rocket motors. *J. Propulsion and Power*, 24(4) :822–833, July-August 2008. Cité p. 163, 171, 172
- [241] S. V. Utyuzhnikov. Some new approaches to building and implementation of wall-functions for modeling of near-wall turbulent flows. *Comput. Fluids*, 34 :771–784, 2005. Cité p. 75
- [242] E. R. Van Driest. Turbulent boundary layer in compressible fluids. *J. Aero. Sci.*, 18(3) :145–160, 216, March 1951. Cité p. 74, 105
- [243] A. Velghe. *Modélisation de l'interaction entre un écoulement turbulent et une paroi ablatable*. PhD thesis, INP Toulouse, 2007. Cité p. 14, 203
- [244] A. Velghe, N. T. H. Nguyen-Bui, and P. Chassaing. Direct numerical simulation of reacting turbulent flow on ablatable surface. *AIAA Paper 2007-4400*, 39th AIAA Thermophysics Conference, 25-28 June 2007. Cité p. 14, 164, 203
- [245] G. L. Vignoles, J. Lachaud, Y. Aspa, and J. Goyhénèche. Ablation of carbon-based materials : multiscale roughness modelling. *Composites Sci. and Tech.*, 69(9) :1470–1477, July 2009. Cité p. 11, 163
- [246] S. Völker, R. D. Moser, and P. Venugopal. Optimal large eddy simulation of turbulent channel flow based on direct numerical simulation statistical data. *Phys. Fluids*, 14(10) :3675–3691, October 2002. Cité p. 73
- [247] T. von Kármán. Über laminare und turbulente Reibung. *Z. Angew. Math. Mech.*, pages 233–252, 1921. Cité p. 34, 73
- [248] T. von Kármán. Mechanische Ähnlichkeit und Turbulenz. *Nach. Ges. Wiss. Göttingen, Math. Phys. Klasse*, pages 58–68, 1930. Cité p. 34, 73
-

- [249] M. J. Walsh. Riblets. In : *Viscous drag reduction in boundary layers*, pages 203–261, 1990. Cité p. 47
- [250] M. Wang and P. Moin. Dynamic wall modeling for large-eddy simulation of complex turbulent flows. *Phys. Fluids*, 14(7) :2043–2051, July 2002. Cité p. 60, 61, 66
- [251] W. Wang and R. H. Pletcher. On the large eddy simulation of a turbulent channel flow with significant heat transfer. *Phys. Fluids*, 8(12) :3354–3366, December 1996. Cité p. 49, 73, 74
- [252] T. Wei, P. Fife, J. Klewicki, and P. McMurtry. Properties of the mean momentum balance in turbulent boundary layer, pipe and channel flows. *J. Fluid Mech.*, 522 :303–327, 2005. Cité p. 40
- [253] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Perseus Books, Reading, Massachusetts, 2nd edition, 1985. Cité p. 18, 165, 191
- [254] H. Wirzberger and S. Yaniv. Prediction of erosion in solid rocket motor by alumina particles. *AIAA Paper 2005-4496*, July 2005. Cité p. 164
- [255] C. E. Wooldridge and R. J. Muzzy. Boundary-layer turbulence measurements with mass addition and combustion. *AIAA J.*, 4(11) :2009–2016, November 1966. Cité p. 49, 50
- [256] M. Wosnik, L. Castillo, and W. K. George. A theory for turbulent pipe and channel flows. *J. Fluid Mech.*, 421 :115–145, 2000. Cité p. 40
- [257] X. Wu and P. Moin. Direct numerical simulation of turbulence in a nominally zero-pressure-gradient flat-plate boundary layer. *J. Fluid Mech.*, 630 :5–41, 2009. Cité p. 37, 38, 40
- [258] J. Zhong, T. Ozawa, and D. A. Levin. Modeling of stardust reentry ablation flows in near-continuum flight regime. *AIAA J.*, 46(10) :2568–2581, October 2008. Cité p. 163
- [259] J. Zhou, R. J. Adrian, S. Balachandar, and T. M. Kendall. Mechanisms for generating coherent packets of hairpin vortices in channel flow. *J. Fluid Mech.*, 387 :353–396, 1999. Cité p. 39, 40

Annexes

ANNEXE A

Publication

Cet article a été accepté pour publication dans *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*. Il a été co-écrit avec J. Amaya, D. Poitou, B. Cuenot and M. El Hafi.

Unsteady coupling of Navier–Stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow.

J. Amaya, O. Cabrit, D. Poitou, B. Cuenot and M. El Hafi
Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer
volume 111, issue 2, pages 295-301, January 2010



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jqsrt

Unsteady coupling of Navier–Stokes and radiative heat transfer solvers applied to an anisothermal multicomponent turbulent channel flow

J. Amaya^{a,*}, O. Cabrit^a, D. Poitou^b, B. Cuenot^a, M. El Hafi^b^a CERFACS - 42, rue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France^b Centre RAPSODEE, Ecole des Mines d'Albi Carmaux, 81013 Albi Cedex 9, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 11 June 2009

Accepted 20 June 2009

Keywords:

Discrete ordinates method
Direct numerical simulation
Turbulent channel
Non-gray gas radiation

ABSTRACT

Direct numerical simulations (DNS) of an anisothermal reacting turbulent channel flow with and without radiative source terms have been performed to study the influence of the radiative heat transfer on the optically non-homogeneous boundary layer structure. A methodology for the study of the emitting/absorbing turbulent boundary layer (TBL) is presented. Details on the coupling strategy and the parallelization techniques are exposed. An analysis of the first order statistics is then carried out. It is shown that, in the studied configuration, the global structure of the thermal boundary layer is not significantly modified by radiation. However, the radiative transfer mechanism is not negligible and contributes to the heat losses at the walls. The classical law-of-the-wall for temperature can thus be improved for RANS/LES simulations taking into account the radiative contribution.

© 2009 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The thermal interaction between a fluid and a solid takes place at the interface, where energy is transported by three mechanisms: convection, conduction and radiation. While the first two mechanisms have been studied for nearly one century, only in the last decades models for the coupled interaction with radiation have been developed. These models have evolved, from the 1D gray gas approximation of Viskanta in 1963 [1] to the turbulence–radiation interaction channel simulations studied by Soufiani et al. in 1990 [2]. To the authors knowledge, this is the first time that a 3D unsteady coupling of direct numerical simulation (DNS) and gas radiation solvers, on a non-gray multicomponent gas, is performed. The present is an exploratory work and is intended to be a

starting point in the research for a detailed comprehension of the fluid/wall thermal interactions.

In industrial applications for combustion systems, radiation is known to influence the behavior of the flow as shown by Schmitt et al. [3]. Conductive energy exchange occurs at a very small scale near the wall, which implies a fine resolution of the Navier–Stokes solver, and consequently a rise in the computational cost. One way to avoid these problems is to construct a model that predicts the behavior of the boundary layer, from quantities available in coarser meshes. DNS are often used to study and derive such models for LES and RANS applications, as it resolves all mechanisms to the smallest active scale.

1.1. Case of study

As presented in Fig. 1, the classic computational domain for turbulent minimal channel flow DNS is used [4,5] at a friction Reynolds number of $Re_\tau = 400$ which correspond to a Reynolds number of $Re = 7530$. Periodic

* Corresponding author. Tel.: +33 5 61 19 30 08; fax: +33 5 61 19 30 00.
E-mail addresses: amaya@cerfacs.fr, jarodz@hotmail.com (J. Amaya).

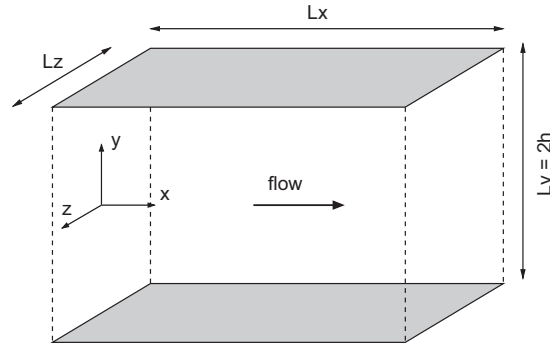


Fig. 1. Box dimensions of the computational domain: $Lx = 3.5h$, $Ly = 2h$, $Lz = 1.3h$.

boundary conditions are applied, in the Navier–Stokes solver, in the streamwise (\bar{x}) and spanwise (\bar{z}) directions. Moreover, the streamwise flow is enforced by adding a space/time constant source term to the momentum conservation equation, while a volume source term that warms the fluid is added to the energy conservation equation to sustain the bulk temperature, $T_b = 2000$ K, as presented in [6]. Finally, a no-slip isothermal boundary condition is used at the wall with a constant temperature of $T_w = 1750$ K.

The computational domain is composed of 292 142 hexahedral elements constructed from 307 824 grid points ($44 \times 159 \times 44$, in x , y and z). Grid spacing in viscous wall units is setup to be at least half the step size of the minimal channel flow DNS of Jiménez and Moin [4], namely $\Delta x^+ \approx 32$ in the x direction and $\Delta z^+ \approx 12$ in the z direction. In the wall-normal direction grid spacing is refined in the near wall zone: the first point off the wall is at $y^+ \approx 0.9$ and the maximum spacing is $\Delta y_{\max}^+ \approx 6.5$.

The gas used in the present work is a mixture of seven reacting species typical of many industrial applications in the energy sector: CO, CO₂, H, H₂, H₂O, OH and N₂.

1.2. Coupling flow equations with radiation

Radiation and flow dynamics are coupled through the radiative heat flux term q_i^{rad} in the multispecies reacting total non-chemical energy conservation equation

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i E) = \dot{\omega}_T - \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i^{gas} + q_i^{rad}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) + u_i \mathcal{S}_m + \mathcal{Q} \quad (1)$$

In this expression i -subscripted quantities refer to variables dependent on directions, ρ is the density of the gas, E is the total energy, u is the velocity, $\dot{\omega}_T$ is the heat release due to the chemical reaction, q_i^{gas} is the heat flux of the gas, q_i^{rad} is the radiative heat flux, \mathcal{S}_m is the momentum source term, \mathcal{Q} is the energy source term and σ_{ij} is the total stress tensor. The divergence of the radiative heat flux is called the radiative source term \mathcal{S}_r , and can be obtained using the conservation equation of

radiative energy [7]:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (q_i^{rad})(\mathbf{x}) = \mathcal{S}_r(\mathbf{x}) = \int_0^\infty \kappa_\nu (4\pi I_{b\nu}(\mathbf{x}) - G_\nu(\mathbf{x})) d\nu \quad (2)$$

$$G_\nu(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{s}_i) d\Omega_i \quad (3)$$

where \mathbf{x} is a location vector, κ is the absorption coefficient, ν is the frequency, $I_{b\nu}$ is the blackbody emitted intensity and G_ν is the sum of the incident intensities coming from all solid angle directions \mathbf{s}_i , expressed by relation (3). Eq. (2) states that the radiative source term in an infinitesimal volume around \mathbf{x} , is equal to the difference between the emitted and the absorbed incident radiation.

2. Numerical tools

2.1. Navier–Stokes solver

DNS have been computed using AVBP [8]. This LES/DNS code has been designed to solve the full 3D compressible reacting Navier–Stokes equations on structured, unstructured and hybrid meshes. Numerous publications have shown the efficiency of this code.¹ In the present work, a third order in time and fourth order in space Galerkin finite element numerical scheme has been used.

2.2. Radiative heat transfer solver

Eq. (2) is calculated using DOMASIUM [9], a code that resolves the 3D radiative heat transfer equation over structured, unstructured and hybrid meshes, using the discrete ordinates method [7]. The main features of the code include:

- Intensities at the faces of each unstructured cell can be computed using exponential [10,11] or diamond mean flux schemes [12].
- An angular discretization is used to integrate the incident intensity G_ν over all the solid angles Ω . Possible angular quadratures includes S_N , T_N and LC_{11} [13].

¹ <http://www.cerfacs.fr/cfd/CFDPublications.html>.

- Spectral integration can be performed using narrow band (SNB-cK) [14] or global spectral models (FS-SNBcK [15], WSGG[16]).
- Boundary conditions are characterized by the emissivity ε_w , which can vary from $\varepsilon_w = 1$ (black walls) to $\varepsilon_w = 0$ (reflective walls). When using the narrow band model, the boundary emissivity can also be setup to vary with the frequency: $\varepsilon_w = \varepsilon_w(\nu)$.

Parallelization is done by direction/frequency or direction/domain decomposition, depending on the spectral model used. This allows to solve complex geometries on massively parallel computers, and reduces the overall computational cost.

2.2.1. Direction/frequency parallelization

This method is essentially used for the narrow band model, SNB-cK. The terms of the integral in (2) are decorrelated (in space and frequency), so each processor can independently calculate the intensities of a cell and add their contribution to the neighbor cells. Integration is done by addition of all the calculated intensities at the end of the cycle. Memory and CPU resources are best used when each processor computes a minimum number of directions.

As shown in Fig. 2 (left), when the number of processors $P_r = 10$ is superior to the number of directions $N_{dir} = 5$, each processor calculates a fraction of the total narrow bands in one direction. In this particular example, each processor computes $B_d = N_{dir}/P_r = 0.5$ directions. The solver can handle any positive real value of B_d . Tests have shown a super linear speedup, most probably due to the cache effect.

2.2.2. Direction/domain parallelization

When a spectral model uses band groupement, as in the FS-SNBcK and WSGG methods, every processor needs to access the full spectrum data. The problem is then divided in two tasks: (a) calculate the emitted intensities of each cell in the domain and (b) add the contributions of each cell to the neighbor in a given direction for angular integration.

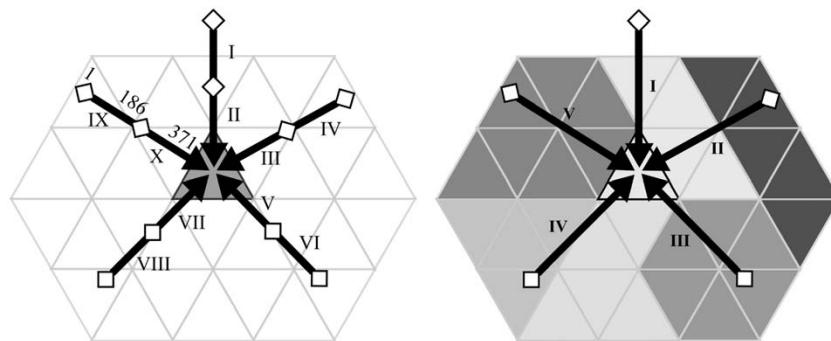


Fig. 2. Left: direction/frequency parallelization. In this example for each cell of the domain, 10 processors, noted from I to X, calculate five directions. Each processor computes only half of the spectrum in one direction. Right: direction/domain parallelization. In this case with six processors, emitted intensities are first calculated by domain decomposition using all available processors, then the five directions are integrated using only five processors (one processor must stay idle during angular integration).

Fig. 2(right) shows how task (a) can be performed by domain decomposition (emitted intensity only requires the cell temperature, the pressure and the species mass fractions), and task (b) is done independently by each processor.

Here B_d can only take positive integer values, so if the number of processors is superior to the number of directions, some processors may stay idle during the angular integration. Tests have shown that task (a) takes much more computational time than task (b), but increasing the number of processors will eventually lead to a stagnation of the speedup factor. Idle processors remain an issue. New parallelization techniques are currently being studied to avoid this problem.

2.3. Coupling strategy

During the coupled simulation the Navier–Stokes solver needs to know the radiative source term \mathcal{S}_r , and the radiation solver needs to know the temperature T , the pressure P and the species molar concentration fields X_k .

Fig. 3(a) shows how the data can be exchanged, in a mode called sequential coupling strategy (SCS), where all the computing resources are allowed alternatively between the two codes. Another solution is to use a parallel coupling strategy (PCS) where both solvers run together sharing computational resources and using the data obtained from the last coupling iteration as shown in Fig. 3(b) [17]. In the present work the PCS was used.

A proper coupling strategy should acknowledge a good synchronization in physical and CPU time.

2.3.1. Synchronization in physical time

In compressible flow dynamics acoustics limits the simulation time step to the Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) condition: $\Delta t_{CFL} = CFL \cdot \Delta x / (|\bar{u}| + c)$, while the radiative source term changes only about every convective characteristic time $\Delta t_c = \Delta x / |\bar{u}|$, where Δx is the mesh step, c is the sound speed and \bar{u} the mean velocity. This time difference allows to simulate $N_i = \Delta t_c / \Delta t_{CFL}$ flow steps in the DNS code for each iteration of the radiation solver [18].

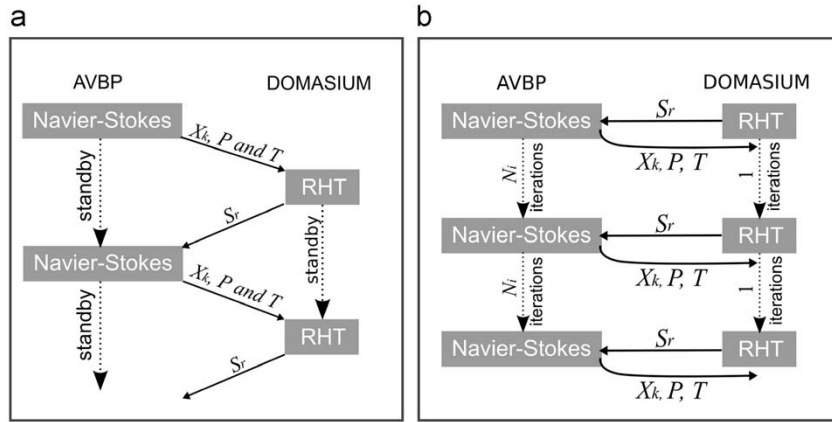


Fig. 3. (a) Sequential coupling strategy (SCS) and (b) parallel coupling strategy (PCS).

2.3.2. Synchronization in CPU time

The time between two coupling iterations must guarantee that N_i flow iterations are computed for each radiation iteration: $N_i \cdot T_f = T_r$, where T_f and T_r are the overall computational time of 1 iteration of each code. These values depend on the number of processors allowed:

$$T_f = \alpha_f(P_f)T_f^1/P_f \tag{4}$$

$$T_r = \alpha_r(P_r)T_r^1/P_r \tag{5}$$

where T^1 is the computational time on 1 processor, P_* is the number of processors allowed and $\alpha_*(P_*)$ is the speed-up factor. In a perfectly scaling code, this last value can be considered equal to 1. Combining these expressions and knowing that the total number of processors allowed is $P = P_f + P_r$, a balanced distribution of the processors can be obtained as

$$P_f = \frac{P \cdot T_f^1}{T_r^1/N_i + T_f^1} \tag{6}$$

Because of the fine resolution of the DNS, in the present work each radiative iteration was calculated every nine flow iterations. Communications between the DNS and the radiation solver are managed by a dynamic coupling software, called PALM [19].

3. Selection of the radiation model

On unsteady coupled simulations, the radiation methods must respond to two constrains: (a) the results must approach the reference data and (b) the computational cost must be low. While steady coupled simulations can be performed using only (a), unsteady applications, as for instance DNS or LES of combustion systems, need both (a) and (b).

Three aspects were studied when selecting the radiative models: the optical thickness of a 1D gas mixture layer of size h , the spectral behavior of the different models, and the angular discretization of the full domain.

3.1. Optical thickness

The mixture's absorption coefficient and the characteristic length of the configuration are used to determine the interaction distance of the radiated energy and the gas. The expression $A(h) = 1 - e^{-\bar{\kappa}h}$ determines the fraction of energy absorbed by a gas with a mean absorption coefficient $\bar{\kappa}$, at a distance h . The exponent $\tau = \bar{\kappa}h$ is the optical thickness of the gas. In a first approximation, the mean Planck absorption coefficient $\bar{\kappa}_p$, described by equation (7) [7], is used to calculate the optical thickness and the absorption properties of the mixture.

$$\bar{\kappa}_p = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int_0^\infty \kappa_\nu I_{b\nu} d\nu \tag{7}$$

Eq. (7) is solved by numerical integration using the SNB approximation [14]. A value for the optical thickness of the channel was calculated: $\tau_h \approx 0.0066 \ll 1$. This value indicates that less than 1% of the energy emitted at the center of the channel will be absorbed by the gas. The optical thickness of the channel indicates that most of the radiated energy will impact the walls before getting absorbed by the medium. An increment of the wall heat flux should be detected, but no major modifications of the temperature fields are expected.

3.2. The spectral models

Using the narrow band approximation, at the distance h , a non-scattering gas column that only emits and absorbs in one optical path will produce in a narrow band a mean intensity that can be expressed using the following relations:

$$\langle I(h) \rangle_{\Delta\nu} = \int_{\Delta\nu} T_\nu(h) I_{b\nu} d\nu = \langle I_b \rangle_{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} T_\nu(h) d\nu \tag{8}$$

$$= \langle I_b \rangle_{\Delta\nu} \Delta\nu \langle T(h) \rangle_{\Delta\nu} \tag{9}$$

Quantities that are averaged over a narrow band are described using the operator $\langle \cdot \rangle_{\Delta\nu}$. An accurate value for the mean transmissivity of the narrow band $\langle T(h) \rangle_{\Delta\nu}$ can be calculated using the Malkmus model (10). This value is

then used to solve Eq. (9). The numerical solver is also used to integrate Eq. (8) using expression (11).

$$\langle T(h) \rangle_{\Delta\nu} = \exp \left[\Phi_{\Delta\nu} \left(1 - \left(1 + \frac{2\overline{\kappa_{\Delta\nu}}h}{\Phi_{\Delta\nu}} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (10)$$

$$T_\nu(h) = e^{-\kappa_\nu h} \quad (11)$$

Here, the envelope of the absorption coefficient κ_ν in the narrow band $\Delta\nu$ is reconstructed by using the SNB parameters $\overline{\kappa_{\Delta\nu}}$ and $\Phi_{\Delta\nu}$ [20]. Both parameters are obtained by experimental methods [21].

A solver that integrates Eqs. (8) and (9) over 371 narrow bands was developed. 1D computations were carried up to test the performance of the different models supported by the radiation solver. The Malkmus transmittance model was used as a reference. Fig. 4 shows that, between 1750 and 2000 K, temperature range of the channel simulation, the best results are obtained with the SNB-cK method with a high spectral quadrature. However, this method is computationally expensive. The FS-SNBcK method showed a good agreement with the Malkmus model. FS-SNBcK computations present the advantage of saving memory and CPU time, which is desirable for unsteady coupling with the Navier–Stokes solver. This latter method one was the retained for the present calculations.

3.3. Angular quadrature

Selection of the angular discretization was done by comparing the radiative fields (source term, heat flux vector field and wall heat fluxes) obtained with three different angular quadratures on an instantaneous solution of the turbulent channel: LC_{11} (96 directions), S_8 (80 directions) and S_4 (24 directions). No significant differences were detected, therefore, S_4 quadrature was retained. On the boundaries where periodic conditions are applied in the Navier–Stokes computation, fully reflective

boundary conditions are imposed in the radiative code. Emissivity of the solid walls is set to $\epsilon_w = 1$. These ensures the statistical homogeneity of the radiation fields in the streamwise and spanwise directions, without restricting the 3D spatial integration. As expected, these method guarantees a null flux through every plane perpendicular to the homogeneous directions.

4. Results

In this section all profiles shown are obtained by a first order statistical treatment: the solutions are averaged in time, and on the resulting fields spatial averages are performed over the homogeneous directions (\vec{x} and \vec{z}). For any variable f , the quantity \bar{f} represents ensemble average; $\{f\}$ represents the Favre average defined for a quantity f as $\{f\} = \overline{\rho f} / \bar{\rho}$, the single prime (') and the double prime (") represent the turbulent fluctuations with respect to Reynolds and Favre averages, respectively.

Fig. 5(left) shows the profiles of three simulations in standard wall units $T^+ = (T_w - \bar{T})/T_\tau$ with $T_\tau = q_w / (\rho_w C_{p,w} u_\tau)$: the first is a test simulation without chemical reactions and without radiation, the second is a multicomponent reactive simulation without radiation and the third is a coupled multicomponent simulation with radiation. In the first simulation the temperature behaves like a passive scalar and tends towards the Kader logarithmic law [22]. This simulation is used to confirm the validity of the numerical method. Profiles of the two other simulations differ from the first one: the second simulation because of the multicomponent terms arising inside the Navier–Stokes equations [23] (this simulation constitutes the reference case for the coupled computation), and the third one because of both the multicomponent terms and the radiative transfer. Fig. 5(left) shows how the coupled multicomponent simulation differs from the reference values.

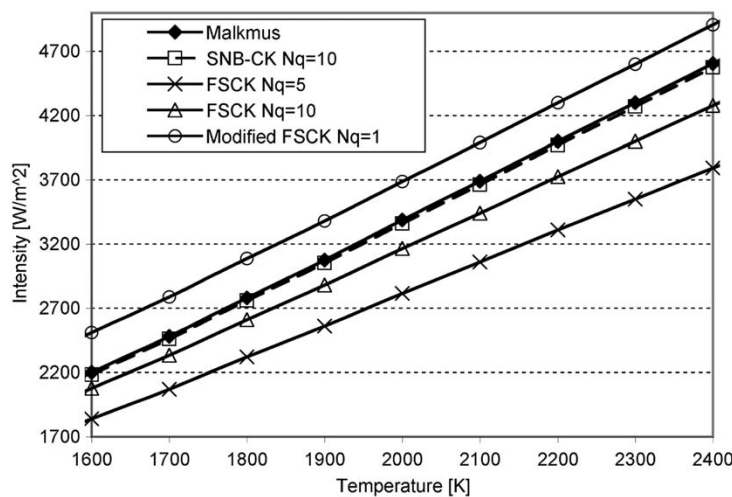


Fig. 4. Intensity at the exit of an isothermal gas column. Nine temperatures where tested using five spectral methods.

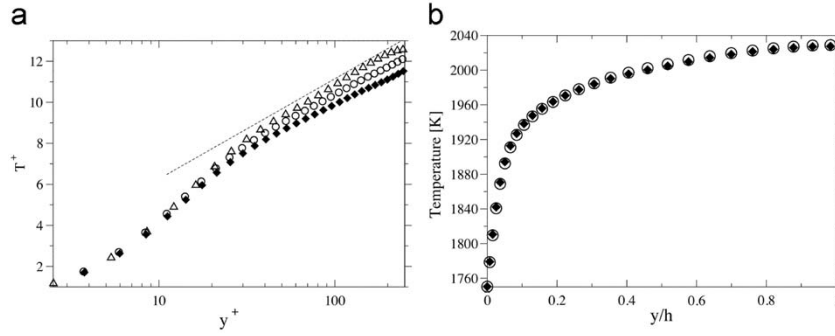


Fig. 5. Left: mean temperature in wall units. Right: mean temperature profile across the channel. Three simulations are represented by the following symbols: Δ , non-reactive simulation without radiation; \circ , multicomponent simulation without radiation; \blacklozenge , coupled multicomponent simulation with radiation; - - -, Kader logarithmic law for $Re \rightarrow \infty$.

Fig. 5(right) shows that the mean temperature is similar for both the reference and the coupled simulations. This implies that the heat flux at the wall is the main quantity modified by the inclusion of radiation. A better understanding of these results is obtained by close inspection of the terms involved in the heat diffusion inside the boundary layer.

In a multicomponent reacting turbulent channel simulation, the energy conservation (1) can be expressed in terms of the specific enthalpy conservation²:

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \mathcal{Q} \quad (12)$$

Applying statistical procedure to Eq.(12) leads to the following expression:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \langle v'' h'' \rangle}{\partial y} = \bar{v} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \tau_{iy} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial y} - \frac{\partial \bar{q}_y}{\partial y} + \bar{\mathcal{Q}} \quad (13)$$

Neglecting the power of the pressure forces $\overline{v \partial p / \partial y}$ and the viscous effects³ $\tau_{iy} \overline{du_i / dy}$, Eq. (13) can be rearranged as

$$\frac{dq_{tot}}{dy} \approx \frac{d}{dy} \left(\underbrace{\bar{\rho} \langle v'' h'' \rangle + \bar{p} \sum_k \langle v'' Y_k' \rangle \Delta h_{f,k}^0}_{q_y^{turb}} + \underbrace{\bar{\rho} \langle h_k Y_k V_{k,y} \rangle}_{q_y^{multi}} - \underbrace{\lambda \frac{dT}{dy}}_{q_y^{fourier}} - q_y^{rad} \right) = \bar{\mathcal{Q}} \quad (14)$$

where q_{tot} is the total heat flux, q_y^{turb} is the turbulent flux of specific enthalpy, q_y^{multi} is the multicomponent laminar flux and $q_y^{fourier}$ is the Fourier flux. These three terms will be compared to the radiative flux term q_y^{rad} . The mean value of the energy source term $\bar{\mathcal{Q}}$ is constant in the wall-normal direction, implying that the total heat flux $q_{tot}(y)$ is represented by a line with a slope equal to $\bar{\mathcal{Q}}$.

Fig. 6 shows the four heat fluxes normalized by the Fourier flux at the wall $\|q_w^{fourier}\|$. It can be seen that the coupled and non-coupled heat fluxes remain almost the same, indicating the negligible coupling between the Navier–Stokes and the radiation equations.

² Ref. [24] gives details on the different forms of the energy transport equation.

³ In the present simulation a low Mach number of $M = 0.2$ was used.

In the reference simulation only the Fourier flux contributes to the total heat flux at the wall, whereas in the coupled simulation both the Fourier and the radiative fluxes contribute to it. The shape of the Fourier heat fluxes in both simulations is unchanged, and the relative error between their value at the wall is less than 1%. This implies that changes in the slope of the total heat flux in the coupled simulation is mainly due to the radiative heat flux, which accounts for about 7% of the total heat flux.

The profile of q_y^{rad} is linear in this particular simulation, which indicates that the boundary data can be predicted from off-layer data in coarser meshes or directly from the radiation solver, whenever the optical thickness of the turbulent boundary layer (TBL) remains low.

In the context of LES or RANS simulations, this means that for optically thin TBL with low temperature gradients, usual law-of-the-wall may be applied, provided that the term q_w^{rad} is added to the total heat flux of the gas at the wall. The quantity q_w^{rad} may be directly obtained using the radiation solver and can be injected without any special treatment on the law-of-the-wall of the Navier–Stokes solver.

5. Conclusions and perspectives

In the studied case, representing a low optical thickness and low temperature gradient configuration, no coupling was detected between the radiation term and the other energy conservation contributions.

Regarding the present database, it is not necessary to resolve the coupled Navier–Stokes/radiation equations in the turbulent boundary layer to capture the correct physics of the energy transfer to the wall. Indeed, this task could be very expensive in the context of RANS/LES applications for which law-of-the-wall treatment already gives reasonable results at convenient costs. The contribution of the radiative heat fluxes at the boundaries can be independently calculated using a radiation solver and added to the flux prediction of the law-of-the-wall used in the RANS/LES simulation. For instance in the present case, such a method could have improved the heat flux prediction of 7%.

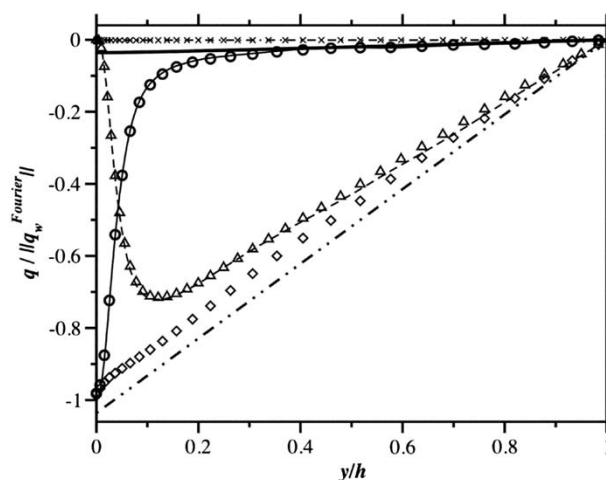


Fig. 6. Heat flux balance scaled by the modulus of the Fourier flux at the wall $\frac{q}{|q_w^{Fourier}|}$. Symbols correspond to simulations without radiation, and lines to coupled multicomponent simulations with radiation. —◇— and —◇—: total heat flux, q_{tot} ; —○— and —○—: Fourier heat flux, $q_y^{Fourier}$; —·— and ··: multicomponent laminar flux, q_w^{multi} ; - - - and △: turbulent flux of specific enthalpy, q_w^{turb} ; —: radiative heat flux.

To generalize this conclusion to different kinds of mixture/temperature gradients boundary layers, simulations with strong temperature variations and higher optical thickness will be investigated.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge the National Research Agency of France (ANR) and the EM2C laboratory at Ecole Centrale Paris for their help.

References

- [1] Viskanta R. Interaction of heat transfer by conduction, convection, and radiation in a radiating fluid. *Journal of Heat Transfer* 1963;85:318–28.
- [2] Soufiani A, Mignon P, Taine J. Radiation–turbulence interaction in channel flows of infrared active gases. In: *Proceedings of the ninth international heat transfer conference*, vol. 6. Washington, DC: Hemisphere; 1990. p. 403–8.
- [3] Schmitt P, Poinso T, Schuermans B, Geigle K. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *Journal of Fluid Mechanics* 2007;570:17–46.
- [4] Jiménez J, Moin P. The minimal flow unit in near-wall turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 1991;225:213–40.
- [5] Kim J, Moin P, Moser R. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* 1987;177:133–66.
- [6] Cabrit O, Artal L, Nicoud F. Direct numerical simulation of turbulent multispecies channel flow with wall ablation. In: *39th AIAA thermophysics conference*, AIAA Paper 2007–4401.
- [7] Modest M. *Radiative heat transfer*. 2nd ed. San Diego: Academic Press; 2003.
- [8] Schönfeld T, Rudgyard M. Steady and unsteady flows simulations using the hybrid flow solver AVBP. *AIAA Journal* 1999;37(11):1378–85.
- [9] Joseph D. *Modelisation des transferts radiatifs en combustion par methode aux ordonnees discrettes sur des maillages non structures tridimensionnels*. Phd thesis, INP Toulouse; 2004.
- [10] Sakami M, Charette A. A new differencing scheme for the discrete ordinates method in complex geometries. *Revue degenerale de thermique* 1998;37:440–9.
- [11] Sakami M, Charette A, LeDez V. Radiative heat transfer in 3-dimensional enclosures of complex geometry by using the discrete ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 1998;56(4):517–33.
- [12] Ströle J, Schnell U, Hein K. A mean flux discrete ordinates method interpolation scheme for general coordinates. In: *3rd international conference on heat transfer (Antalaya)*, 2001.
- [13] Koch R, Becker R. Evaluation of the quadrature schemes for the discrete ordinates method. In: *Elsevier (Ed.), Eurotherm73 on computational thermal radiation in participating media*, vol. 11; 2003. p. 59–74.
- [14] Liu F, Gulder O, Smallwood G, Ju Y. Non-gray gas radiative transfer analyses using the statistical narrow-band model. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1998;41:2227–36.
- [15] Perez P, Joseph D, Haffi ME. Mise en place d'un modèle rapide de propriétés radiatives de gaz pour le couplage rayonnement-combustion. In: *13èmes Journées Internationales de Thermique*, 2007.
- [16] Hottel HC, Sarofim AF. *Radiative transfer*. New York: McGraw-Hill; 1967.
- [17] Duchaine F, Mendez S, Nicoud F, Corpron A, Moureau V, Poinso T. Coupling heat transfer solvers and large eddy simulations. In: *Proceedings of the summer program*. Center for Turbulence Research: A Ames/Stanford University; 2008.
- [18] dos Santos RG. *Large eddy simulations of combustion including radiative heat transfer*, Phd thesis, Ecole Centrale de Paris; 2007.
- [19] Piacentini A. PALM: a dynamic parallel coupler. In: *VECPAR*, 2002, p. 479–92.
- [20] Malkmus W. Random Lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America* 1967;57:323–9.
- [21] Soufiani A, Taine J. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-k model for H₂O and CO₂. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1997;40:987–91 [Technical note].
- [22] Kader BA. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 1981;24(9):1541–4.
- [23] Giovangigli V. *Multicomponent flow modeling, modeling and simulation in science, engineering and technology*. Birkhäuser: Boston; 1999.
- [24] Poinso T, Veynante D. *Theoretical and numerical combustion*, 2nd ed. R.T. Edwards; 2005.

ANNEXE B

Publication

Cet article a été soumis pour publication dans le journal *Flow Turbulence and Combustion*. Il a été co-écrit avec F. Jaegle, S. Mendez and T. Poinso.

Implementation methods of wall-functions in cell-vertex numerical solvers.

F. Jaegle, O. Cabrit, S. Mendez and T. Poinso

Flow Turbulence and Combustion

Flow, Turbulence and Combustion manuscript No. (will be inserted by the editor)

Implementation methods of wall functions in cell-vertex numerical solvers

Felix Jaegle · Olivier Cabrit ·
Simon Mendez · Thierry Poinsot

Received: date / Accepted: date

Abstract Two different implementation techniques of wall functions for cell-vertex based numerical methods are described and evaluated. The underlying wall model is based on the classical theory of the turbulent boundary layer. The present work focuses on the integration of this wall-model in a cell-vertex solver for large eddy simulations and its implications when applied to complex geometries, in particular domains with sudden expansions (more generally in presence of sharp edges). At corner nodes, the conjugation of law of the wall models using slip velocities on walls and of the cell-vertex approach leads to difficulties. Therefore, an alternative implementation of wall functions is introduced, which uses a no-slip condition at the wall. Evaluation is carried out on the examples of a turbulent periodic channel flow, a turbulent pipe flow with a sudden expansion to assess the performance at corners as well as an injector for aero-engines, example for an industrial-scale application with a complex geometry.

F. Jaegle
CERFACS, 42 Av. Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France
Tel.: +33-(0)5-61 19 31 09
Fax: +33-(0)5-61 19 30 00
E-mail: felix.jaegle@cerfacs.fr

O. Cabrit
CERFACS, 42 Av. Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France
E-mail: olivier.cabrit@cerfacs.fr

S. Mendez
CERFACS, 42 Av. Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France
Present address: of S. Mendez
CTR, Stanford University, Bldg. 500
488 Escondido Mall, Stanford, CA 94305-3035, USA
E-mail: smendez@stanford.edu

T. Poinsot
Institut de mécanique des fluides de Toulouse (CNRS-INPT-UPS), Allée du Professeur-Camille-Soula, 31400 Toulouse, France
E-mail: thierry.poinsot@imft.fr

1 Introduction

A correct treatment of walls in Large Eddy Simulations (LES) of industrial-scale complex geometries remains a challenging task. Despite growing computing resources, mainly in the form of massively parallel machines, the resolution of boundary layer flows remains out of reach for routine application [16], making wall modeling a crucial ingredient of practical LES [11]. Alongside hybrid approaches of LES and RANS (Reynolds Averged Navier-Stokes) like Detached Eddy Simulation (DES [24, 23]), wall functions [3, 21] are often the method of choice for large LES cases (e.g. combustion chambers [20]). Here, wall functions avoid to resolve the turbulent eddies that are proportional in size to the wall-normal distance (as opposed to wall-resolved LES), as well as the strongest gradients in the viscous sublayer (which is still necessary when resolving RANS equations near the wall, as in DES approaches). The gain in terms of grid resolution is considerable [16], while very satisfying precision can be obtained even for complex flows [11].

Published studies on wall functions mainly focus on the underlying wall-model to take into account more physical details, such as heat fluxes [5], streamwise pressure gradients [7] or chemical reactions [2] just to name a few. On the other hand, relatively few sources treat the actual implementation of wall functions into a flow-solver. In this paper, it will be shown that there are several ways to couple wall functions with a numerical scheme and that these differences can affect the results of a LES. In particular, this is the case in configurations with a flow over a sudden expansion (or simply a step) and more generally in complex geometries. The study is limited to cell-vertex-type solvers. In the first part, the wall-modeling approach is laid out, followed by a description of the cell-vertex formalism, the methods of implementing wall functions therein and the related problems. Finally the different methods are evaluated and compared on several test cases ranging from a turbulent channel flow to a premixing swirler for aero-engines.

2 Wall modeling approach

Wall modeling in itself is not the main interest of the present work. Therefore, a very basic model using classical boundary layer theory is used and shall be presented briefly in the following. It should be noted that the implementation strategies presented in this paper can in principle be combined with other, more sophisticated wall law formulations. Furthermore, although turbulent heat transfer is an important part in a wall modeling approach, it shall be excluded in this paper, which will focus on momentum conservation.

The fully developed turbulent boundary layer flow over an infinite flat plate is considered. This implies that, in a Reynolds-averaged form, the problem is steady ($\partial/\partial t = 0$) and one-dimensional ($\partial/\partial x = 0$, $\partial/\partial z = 0$) with the wall-distance y being the only relevant spatial direction and the streamwise velocity \bar{u} the sole non-zero mean velocity component. Here, Reynolds-averaged variables are denoted with the bar-operator ($\bar{\cdot}$). The density ρ as well as the heat capacity at constant pressure C_P are considered constant in this context. An additional assumption is the absence of chemical reactions.

The momentum equation of the time-averaged flow then reduces to:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{\tau}_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \underbrace{\bar{\rho} u'v'}_{\bar{\tau}_t} \quad (1)$$

Where $\tau_{xy} = \mu \partial u / \partial y$ is the viscous stress tensor and τ_t the Reynolds-stress tensor, which can be modeled using the Boussinesq assumption:

$$\tau_t = -\mu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \quad (2)$$

The case of a flat plate is characterized by the absence of a longitudinal pressure gradient $\partial \bar{p} / \partial x = 0$. The momentum equation written in terms of μ and μ_t then takes the following form:

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} (\bar{\mu} + \mu_t) \right) = 0 \quad (3)$$

This equation states that the total level of friction, $\tau_{tot} = \bar{\tau}_{xy} - \bar{\tau}_t$ is constant throughout the boundary layer. It implies that the total friction must be equal to the wall-friction, which corresponds to the viscous wall shear stress $\tau_w = \bar{\mu} \partial \bar{u} / \partial y|_w$, since the turbulent stress vanishes at the wall due to the absence of any fluctuations. The subscript 'w' stands for variables evaluated at the wall. Integration of equation 3 using $\tau_{tot} = \tau_w$ yields:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} (\bar{\mu} + \mu_t) = \tau_w \quad (4)$$

For the following steps, it is convenient to introduce wall units, based on the friction velocity $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_w}$ and defined as:

$$y^+ = \frac{\rho_w u_\tau y}{\mu_w} \quad u^+ = \frac{\bar{u}}{u_\tau} \quad \mu^+ = \frac{\bar{\mu}}{\mu_w} \quad \mu_t^+ = \frac{\mu_t}{\mu_w} \quad (5)$$

In wall units, the inertial layer is characterized by: $\mu_t^+ \gg \mu^+$. The momentum equation 4 reduces to:

$$\frac{d u^+}{d y^+} \mu_t^+ = 1 \quad (6)$$

A closure for the turbulent viscosity, is provided by the Prandtl mixing length model [19] for an incompressible boundary layer ($\rho^+ = \bar{\rho} / \rho_w \approx 1$), which states in wall units that:

$$\mu_t^+ = (k y^+)^2 \frac{d u^+}{d y^+} \quad (7)$$

where k is the Von Kármán constant [9]. Injected into equation 6 and integrated, this results in the well-known logarithmic law:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln(y^+) + C \quad (8)$$

The values commonly retained for the model constants are $k = 0.41$ and $C = 5.5$ for confined flows ($C = 5.2$ is rather preferred for external flows).

3 Implementation methods

3.1 The cell-vertex approach

The *cell-vertex* approach is one of the common discretization methods for finite volume schemes, the very popular alternative being the *cell-centered* formulation [6, 25]. While in the latter case, flow variables are stored at the center of the cells, they are stored at the grid nodes in the former.

The key difference is the computation of fluxes through cell boundaries. For cell-centered schemes, the flux through a cell boundary is based on the interpolation of variables situated to *either side* of the cell edge, i.e. from the *centers* of two neighbouring cells. In a cell-vertex scheme, the flux is obtained from the values at the *vertices*, i.e. at either end of the cell edge. Here, vertices are to be understood as points that coincide with the grid nodes but are associated to a grid cell. This means that one grid node can coincide with several vertices, one for each grid cell the node is connected to.

Written in flux variables, the Navier-Stokes equations take the compact form

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{S} \quad (9)$$

where \mathbf{U} is the vector of the conservative flow variables, $\vec{\mathcal{F}}$ the flux tensor of \mathbf{U} and \mathbf{S} the vector of source terms. The flux tensor can be decomposed in a convective part $\vec{\mathcal{F}}^C$ and a viscous part $\vec{\mathcal{F}}^V$:

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^C(\mathbf{U}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{U}, \vec{\nabla} \mathbf{U}) \quad (10)$$

The first important aspect of the *cell-vertex* method is the definition of metrics, in particular of the normal vectors. Here, S_f denotes the normal vector of a given element face (or edge in 2D), defined as pointing towards the exterior. Its length is weighted by the area of the element face (resp. edge length). The normal vector \vec{S}_k at the vertex k of an element (pointing inward) is obtained by

$$\vec{S}_k = \sum_{f \ni k} -\frac{d}{n_v^f} \vec{S}_f \quad (11)$$

where d is the number of spatial dimensions and n_v^f the number of vertices of face f . Figure 1 illustrates the process of calculating \vec{S}_{k_1} , the normal at the vertex $k = k_1$ for a triangular and a quadrilateral element. It has to be noted that this method differs for domain boundaries as explained for diffusive fluxes at the end of this section.

Based on this element description, equation 9 can be written in a semi-discretized form at node j :

$$\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^C \Big|_j - \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j + \mathbf{S} \Big|_j \quad (12)$$

To obtain the divergence of the convective fluxes $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^C \Big|_j$ the element residual R_e is calculated summing flux values located at all vertices k of the element e (the ensemble of these vertices being K_e):

$$\mathbf{R}_e = -\frac{1}{dV_e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k^C \cdot \vec{S}_k \quad (13)$$

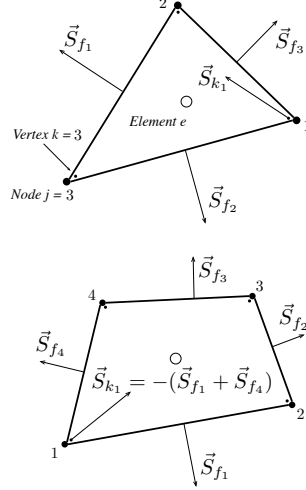


Fig. 1 Schematic of the face- (f) and vertex- (k) normals of a triangular and a quadrilateral element.

Here, V_e is the element volume which is defined as (d being the number of spatial dimensions):

$$V_e = -\frac{1}{d^2} \sum_{k \in K_e} \vec{x}_k \cdot \vec{S}_k \quad (14)$$

The nodal value of the flux divergence is then obtained by summing the weighted residuals $V_e \mathbf{R}_e$ of all cells having a vertex coinciding with the node j (the ensemble of these cells being noted \mathcal{D}_j):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^C \Big|_j = \frac{1}{dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \underline{\mathbf{D}}_{j,e} V_e \mathbf{R}_e \quad (15)$$

This summation, called *scatter-operation*, is schematized in figure 2. The nodal volume $V_j = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} V_e / n_v^e$ is called *dual cell* as it acts as a control volume during the residual *scatter*. Here, n_v^e is the number of vertices of an element e . The residual distribution matrix $\underline{\mathbf{D}}_{j,e}$ is a central part of the numerical scheme that is built upon the cell-vertex formalism and shall not be detailed here.

For the divergence of the viscous terms $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V$, the method applied differs from the one used for the convective fluxes. First, the gradient of the conservative variables $(\vec{\nabla} \mathbf{U})_e$ is calculated for the element e . Using this gradient and the nodal value \mathbf{U}_j allows to calculate the viscous flux tensor from element and node values:

$$\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V = \vec{\mathcal{F}}^V \left((\mathbf{U})_j, (\vec{\nabla} \mathbf{U})_e \right) \quad (16)$$

The divergence is then obtained by summing all contributions in the *dual cell* associated to the node j :

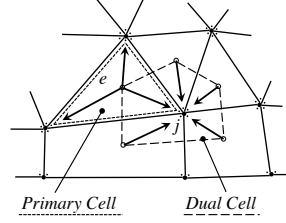


Fig. 2 Schematic of the cell-vertex formalism. The dotted line delimits an element e (primary cell), the dashed line the control volume of the node j (dual cell), arrows symbolize the scatter operation of an element residual to the surrounding nodes (equation 15).

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j = \frac{1}{dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (17)$$

The normal vectors $\vec{S}_{j,e}$ used in this operation are located at the center of a given element e and associated to the node j . Figure 3 schematizes the location and direction of these normals. It can be shown that they are equal to the vertex normals \vec{S}_k , where the vertex k coincides with the node j considered.

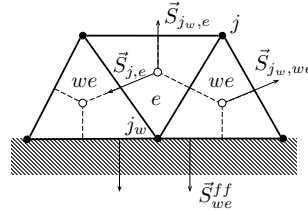


Fig. 3 Sketch of the normals $\vec{S}_{j,e}$ used for the diffusion scheme and the face-based normals \vec{S}_{we}^{ff} appearing at the application of Neumann boundary conditions on elements with boundary faces, noted we .

Applying Neumann boundary conditions in a finite volume framework corresponds to imposing fluxes through the domain boundary. To do this efficiently, the diffusive flux divergence operation in equation 16 is modified for nodes located on wall boundaries, noted j_w (see figure 3): the prediction of the diffusion scheme is corrected by adding fluxes given by the boundary condition, $\vec{\mathcal{F}}_{j_w,we}^{BC}$.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_{j_w} = \underbrace{\frac{1}{dV_{j_w}} \sum_{e \in \mathcal{D}_{j_w}} \vec{\mathcal{F}}_{j_w,e}^V \cdot \vec{S}_{j_w,e}}_{\text{Diffusion scheme prediction}} \quad (18)$$

$$+ \underbrace{\sum_{we \in \mathcal{D}_{j_w}} \vec{\mathcal{F}}_{j_w, we}^{BC} \cdot \vec{S}_{we}^{ff}}_{\text{Boundary correction}}$$

Instead of $\vec{S}_{j,e}$, the correction term uses face-based normal vectors, noted \vec{S}_{we}^{ff} . They are defined as the normals of an element face located on the boundary, as shown in figure 3 for the boundary elements (denoted by we).

3.2 The use of wall functions in LES solvers

In sections 2 and 3.1, the wall model and the numerical framework have been described. The missing ingredient for the implementation of wall laws is how numerics and wall model are combined *in a LES context*. For the sake of clarity, the following paragraphs are limited to a one-dimensional view (in wall-normal direction), analogous to turbulent boundary layer theory. The shear balance in the element adjacent to the wall (noted ' we ') takes the form:

$$\tau_{xy}|_{we} = \frac{d\hat{u}}{dy}\bigg|_{we} (\mu|_{we} + \mu_{sgs}|_{we}) = \frac{\hat{u}_2 - \hat{u}_1}{\Delta y} (\mu|_{we} + \mu_{sgs}|_{we}) \quad (19)$$

where u_1 and u_2 are the velocities at directly on the wall and on the first grid point respectively, ' $\hat{\cdot}$ ' is the LES filter operator, Δy is the wall-distance of the first point and μ_{sgs} the subgrid-scale viscosity. In cases of low near-wall grid resolution, this equation cannot yield correct results: the subgrid-scale viscosity is given by a LES model that is designed to account for stresses in the unresolved scales of turbulence. Near the wall, however, typical models will fail to predict the wall shear stress correctly, as they are not based on physical arguments related to under-resolved, wall-bounded flows. Instead, their behaviour is known to be often unphysical in under-resolved boundary-layers or generally in zones of pure shear [13], for instance in the case of the Smagorinsky model [22].

The central idea of wall functions consists in locally using boundary layer theory (of the type layed out in section 2) in lieu of the diffusion scheme to restore the correct balance in equation 19. In the element adjacent to the wall, the predicted shear stress $\tau_{xy}|_{we}$ is corrected by a value obtained from a wall model, $\bar{\tau}_w^{model}$.

$$\tau_{xy}|_{we} = \bar{\tau}_w^{model} \quad (20)$$

In the present study, $\bar{\tau}_w^{model}$ is obtained from the logarithmic law (equation 8). Written in flow variables, it reveals its practical property of relating the wall shear stress to any point in the velocity profile located inside the inertial layer:

$$\hat{u} = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\bar{\tau}_w}{\rho_{we}}} \ln \left(\frac{\rho_w y \sqrt{\bar{\tau}_w / \rho_{we}}}{\mu|_{we}} \right) + C \quad (21)$$

In practice, this equation can be numerically resolved to provide the wall shear stress as a function of the velocity \hat{u}_2 at the first off-wall point with the wall distance Δy (assuming ρ_{we} and μ_{we} to be constant):

$$\bar{\tau}_w = f(\Delta y, \hat{u}_2) \quad (22)$$

Note that this approach involves Reynolds-averaged variables (noted with the bar operator ‘ $\bar{}$ ’) as filtered variables of the LES. In a wall function approach, it is generally assumed that the near-wall control volume contains a sufficient number of turbulent structures for a Reynolds averaged view to be justified, even in an instantaneous flow field [16]. RANS quantities in the first cell can therefore be combined with instantaneous variables of the LES.

The following sections describe in detail different options of applying equation 21 to the numerical scheme as a wall boundary condition.

3.3 Implementation with slip velocity at the wall

The first, classical method to implement wall functions starts from the idea that corrections should be limited to the nodes on the domain boundary. This can be considered an advantage on unstructured triangle- or tetraedra meshes, where element type and topology are of little influence. In view of the cell-vertex formalism, this means that the predictions of the diffusion scheme have to be modified when summing the contributions of the viscous fluxes at the dual cell associated to each boundary node (eq. 17). This procedure, illustrated in figure 4, consists in having the scheme calculate the wall-normal momentum flux τ_{xy} and subsequently replacing the contributions headed to the wall nodes by the value corrected with the wall function τ_{we} . In an arbitrary 3D geometry, this correction is applied selectively on the wall-normal component of the momentum flux, the direction of shear being aligned with the wall-parallel velocity vector. Finally, the wall-normal velocity is set to zero ($u_{1,\perp} = 0$) as a Dirichlet-type boundary condition (classical Dirichlet or the NSCBC (for Navier Stokes Characteristic Boundary Conditions) [18] equivalent). As nothing is imposed for the wall-parallel velocity, a non-negligible slip-velocity appears on the wall as the scheme advances in time. This velocity has no physical meaning: it should be regarded as a free parameter in the computation as its value depends predominantly on the level of subgrid-scale viscosity in the wall element. This becomes clear when rearranging equation 19 at the wall-element with $\bar{\tau}_w$ obtained from the wall function.

$$\left. \frac{d\hat{u}}{dy} \right|_{we} = \frac{\bar{\tau}_w(\hat{u}_2, y_2)}{\mu|_{we} + \mu_{sgs}|_{we}} \quad (23)$$

Assuming that the velocity at the first node above the wall behaves ideally and thus coincides with the log-law for a given $\bar{\tau}_w$ and the molecular viscosity μ is constant, this equation yields a gradient that will establish between y_1 and y_2 , which depends only on μ_{sgs} (see figure 5 for an illustration). This relation reveals that the method is well-suited for the use in conjunction with the Smagorinsky model, which provides for (unphysically) high levels of subgrid-scale viscosity near the wall, leading to a moderate gradient. In contrast, when used with turbulence models that yield near-zero subgrid-scale velocity at the wall (e.g. WALE [13]), this gradient will be very steep and can lead to reversed slip-velocities, causing spurious oscillations.

For the Smagorinsky model, one can further estimate the magnitude of the slip-velocity

obtained on the wall by writing it in a time-averaged ($\langle \cdot \rangle$ -operator), one-dimensional form (assuming a linear discretization of the velocity profile):

$$\langle \mu_{sgs|we} \rangle = \langle \rho_{we} \rangle (C_s \Delta)^2 \frac{(\langle \hat{u}_2 \rangle - \langle \hat{u}_1 \rangle)}{y_2} \quad (24)$$

Here, C_s is the Smagorinsky constant and Δ a length scale for the cell size. The slip-velocity can be estimated as:

$$\langle \hat{u}_1 \rangle = \langle \hat{u}_2 \rangle - y_2 \frac{\langle \bar{\tau}_w \rangle}{\langle \mu|_{we} \rangle + \langle \mu_{sgs|we} \rangle} \quad (25)$$

Combining equations 24 and 25 finally allows to obtain the average slip velocity $\langle \hat{u}_1 \rangle$ explicitly:

$$\langle \hat{u}_1 \rangle = \langle \hat{u}_2 \rangle - \frac{y_2}{2 \langle \rho_{we} \rangle (C_s \Delta)^2} \left(-\langle \mu|_{we} \rangle + \sqrt{\langle \mu|_{we} \rangle^2 + 4 \langle \rho_{we} \rangle^2 (C_s \Delta)^2 \langle \bar{\tau}_w \rangle} \right) \quad (26)$$

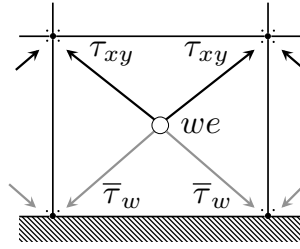


Fig. 4 Application of the wall functions in the slip-wall formulation. Schematic of the *scatter* operation of the momentum flux contributions. Black arrows correspond to contributions calculated by the diffusion scheme, grey arrows to contributions corrected by the wall function.

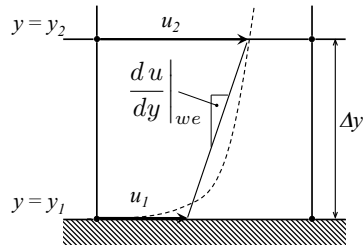


Fig. 5 Overview of the most important variables appearing in the formulation with a slip velocity.

3.4 Corner problem with slip velocity at walls

The procedure, described in section 3.3 leads to a difficulty at corner points. Unlike the Neumann boundary conditions that are applied on the boundary face (see equation 18), the Dirichlet conditions of zero wall-normal velocity are applied directly on the conservative variables at the nodes. At the node coinciding with the corner, the definition of the wall-normal vectors is ambiguous (see figure 6). Following the standard procedure of calculating the nodal wall normal \vec{S}_j^b as the average of the surrounding boundary-face normals \vec{S}_e^{ff} , the resulting normal at the corner point $\vec{S}_{j,c}^b$ (and consequently also the velocity vector) would take an unphysical angle of ≈ 45 degrees. Therefore, at the corner point only, the normal is either chosen equal to the one of the upstream boundary face or set to zero (removing all constraints on the direction of the velocity). Both methods lead to a nodal velocity vector that is aligned with the upstream wall. As a result, however, mass conservation will no longer be respected because of a flux through the boundary face situated at the downstream wall, as illustrated in figure 7.1. To correct that, a (face-based) Neumann boundary condition of zero mass flux can be applied instead of the Dirichlet condition of zero normal velocity. This ensures mass conservation but the correction of the face downstream of the corner effectively reduces the slip-velocity at the corner, leading to perturbations of the flow-field in this area. As the wall-element in a mesh adapted for wall functions is of a relatively large size in order to reach into the inertial layer, these perturbations can take magnitudes that lead to unphysical flow fields or numerical instabilities (see section 4.2).

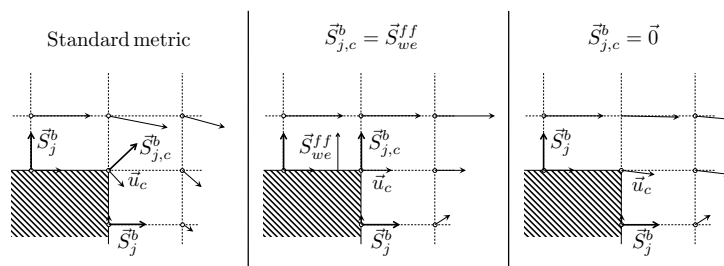


Fig. 6 Schematic illustration of different definitions of the nodal normal vector $\vec{S}_{j,c}^b$ at the corner node. Generic configuration of a flow over a corner.

Note that these difficulties are limited to the cell-vertex approach, as illustrated in figure 7: for a cell-centered formulation (figure 7.3), the wall-normal vector ambiguities and problems of mass-conservation do not appear due to the location of the velocity vectors at the cell-center. In a cell-vertex formalism, these problems can easily be overcome if a no-slip condition is imposed at the wall nodes as shown in figure 7.2. The following sections are therefore dedicated to wall functions with a no-slip condition at the wall.

3.5 Implementation without slip velocity at the wall

The need for an alternative implementation method of wall functions in cell-vertex solvers arises from the problems listed in section 3.4. The idea is consequently to

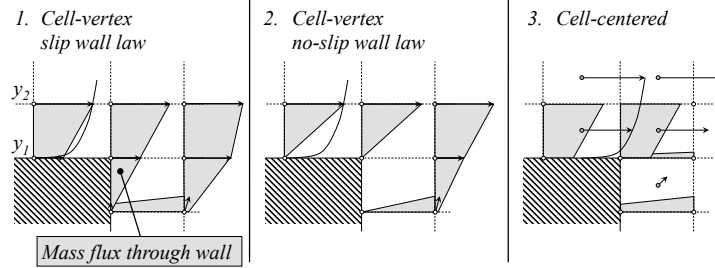


Fig. 7 Schematic of mass fluxes in vicinity of a corner (' \rightarrow ' symbolizes a momentum vector), comparing a cell-vertex scheme with/without slip velocity to the cell-centered approach. Generic configuration of a flow over a corner.

impose a no-slip condition on the wall nodes, which, however, prohibits the application of the wall shear stress at the same location. This is because, in a given timestep, the corrected contributions of the diffusion scheme τ_{we} exclusively affect the nodes they are directed to. Neighbouring nodes are only influenced indirectly in subsequent timesteps. A Dirichlet-condition, imposed after the computation of the diffusive terms will therefore cancel out any effect of the numerical scheme on these nodes. The logical alternative is to apply the wall function away from the wall, at the upper nodes of the first cell, as shown in figure 8. This choice is in fact consistent with the underlying boundary layer theory, as equation 3 clearly shows that the shear is constant throughout the first wall cell (equal to τ_w). The fact that the gradient inside the wall element (figure 9) is unphysically high has no consequence in this case, because the diffusion scheme is completely inactive in this cell, its predictions being entirely replaced by the wall function and the no-slip condition.

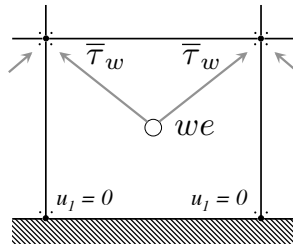


Fig. 8 Application of the wall functions in the no-slip formulation. Schematic of the *scatter* operation of the momentum flux contributions. Grey arrows symbolize the contributions corrected by the wall function.

An overview of the key differences between both implementation methods can be obtained from table 1, where a simplified sequence of events during a numerical timestep is presented.

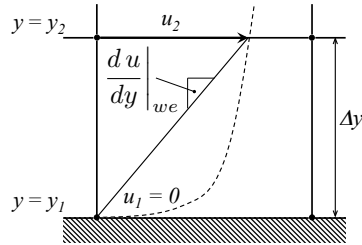


Fig. 9 Overview of the most important variables appearing in the no-slip formulation.

3.6 Limitations of the no-slip approach

The no-slip formulation removes all difficulties related to domains with corners. However, it is compatible only with certain element types at the wall. The slip-wall formulation can be deployed on any type of mesh, as it is an approach limited to the boundary of the domain. The no-slip approach, as it acts inside the fluid *volume*, cannot sensibly be implemented for arbitrary element types. The key example is a pure tetraedra mesh, where the algorithms to establish the connectivity to the off-wall vertices (where the wall function would be applied) are complex and costly. Furthermore, the irregular wall-distances have led to oscillatory behaviour in the tests that were conducted. The no-slip approach is therefore limited to all sorts of prismatic elements (typically prisms and hexaedra) that ensure uniform wall-distance and straightforward access (in terms of connectivity) to the ‘upper’ element vertices. The capability of treating hybrid, unstructured meshes is therefore a prerequisite for the use of no-slip wall functions in complex geometries. This is not a very strong limitation as the use of prismatic elements near the wall can generally be expected to lead to better results than a purely tetraedral mesh.

4 Applications and Results

In the following, both implementation methods are applied to three different cases with increasing complexity. Each application, together with a discussion of the results is presented in an individual section.

4.1 Turbulent channel flow

A Large Eddy Simulation of a periodic channel flow serves as a first test case for the validation of both wall function implementations on smooth walls without corners. The configuration consists of a doubly periodic box (in x - and z direction) with walls on the top and bottom surfaces (in y -direction). Six different cases are considered (a summary is given in table 2), distinguished by different Reynolds number, based on bulk properties (subscript ‘b’), defined as:

No-slip wall law		Slip wall law
Initial field of conservative variables \mathbf{U}		
Calculation of the flux tensor $\vec{\mathcal{F}}$		
Neumann boundary conditions		
τ_w at y_2 (1st off-wall node)		τ_w at y_1 (wall)
Advancement in time: $\partial\mathbf{U}/\partial t + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{S}$		
New field of conservative variables \mathbf{U}		
Correction of conservative variables \mathbf{U} Dirichlet boundary conditions		
$u_1 = 0$		$u_{1,\perp} = 0$
Final field of conservative variables \mathbf{U}		

Table 1 Comparative overview of the no-slip and slip wall function implementations. Simplified sequence of events during one computational time step.

#	Re_b	Re_τ	y^+	grid nodes	2δ [m]
1	20 000	≈ 322	≈ 30	29 x 21 x 29	$1.5 \cdot 10^{-3}$
2	40 000	≈ 594	≈ 50	33 x 25 x 33	$3.0 \cdot 10^{-3}$
3	80 000	≈ 1100	≈ 100	25 x 23 x 25	$6.0 \cdot 10^{-3}$
4	200 000	≈ 2524	≈ 100	33 x 51 x 33	$1.5 \cdot 10^{-2}$
5	400 000	≈ 4798	≈ 150	33 x 61 x 33	$3.0 \cdot 10^{-2}$
6	2 000 000	≈ 20816	≈ 1000	41 x 41 x 41	$1.5 \cdot 10^{-1}$

Table 2 Summary of the turbulent periodic channel cases.

$$Re_b = \frac{\rho_b D_h u_b}{\mu_b} \tag{27}$$

Where $D_h = 4\delta$ is the hydraulic diameter. The mesh in all cases is of uniform, cartesian type with grid resolutions adapted to the respective values of Re_b . All results are obtained using the second-order accurate Lax-Wendroff scheme [12].

Detailed statistics are presented in figures 10 and 11 for a single, typical case (# 4) at $Re_b = 200\,000$, which corresponds to a friction Reynolds number of $Re_\tau \approx 2524$. Figure 10 shows profiles of dimensionless longitudinal velocity u^+ . There is a good agreement between the logarithmic law, DNS data of Hoyas and Jiménez [8] and both LES simulation results near the first grid point, showing that the most direct effect that wall functions have on the flow is correctly reproduced. In the region of the first few grid points towards the center of the channel, profiles from both wall functions start to deviate from the logarithmic law, an effect that is slightly stronger in the no-slip formulation. This is most probably due to under-resolved and thus unphysical turbulent mechanisms near the wall, which are a result of the inherent lack of grid resolution that is described, for instance, by Nicoud et al. [14] (in the context of a wall function approach) and studied in a more general context by Piomelli et al. [17].

In this intermediate layer, the subgrid-scale viscosity is given by a LES model and therefore takes values that are lower than a turbulence model in a RANS approach would predict, leaving a share of the stress balance to be accounted for by resolved Reynolds stresses. On the other hand, the grid resolution in these zones is determined by the wall function approach and therefore too coarse to resolve turbulent structures at scales small enough for a LES to result in correct Reynolds stresses. A study of the resolution requirements in LES of shear flows can be found in the work of Baggett et al. [1]. Differences between both formulations can be observed on the velocity fluctuation

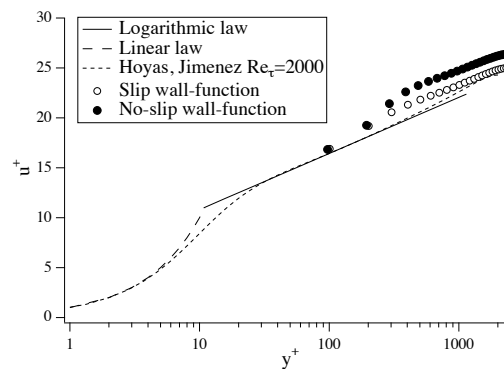


Fig. 10 Turbulent channel, dimensionless velocity profiles. Comparison between the analytical profile, DNS data [8] and LES results, obtained with a second-order Lax-Wendroff scheme, using wall functions in slip- and no-slip formulation. Case of $Re_b = 200000$.

profiles shown in figure 11 where the peak of the no-slip wall functions is displaced by approximately one point away from the wall with respect to the one of the slip-wall function. This indicates that for the slip-formulation the under-resolved near-wall vortical structures can be accommodated by the wall nodes thanks to the presence of a slip velocity, whereas in the case of the no-slip results, these structures are shifted away from the wall (figure 12), which seems to slightly increase their negative effect.

An overview of the global performance of both wall functions over a wide range of Reynolds numbers is shown in figure 13. Here, the mean friction coefficient C_f of the channel flow is compared to the classical correlations of Kármán and Nikuradse [10] as well as Petukhov [15]. The general trend observed is that for low Reynolds numbers, the slip-formulation yields superior results but deteriorates slightly for increasing Re_b . Inversely, the no-slip formulation shows the largest errors for low Reynolds numbers with increasingly good agreement for growing Re_b , eventually surpassing the accuracy of the slip-formulation. This observation can be explained by the diminishing influence of the near-wall effects relative to the channel height that work to the disadvantage of the no-slip formulation.

4.2 Flow over a sudden expansion

The flow over a sudden expansion is well-suited as a test case for the corner problem. It consists of a circular upstream tube of diameter D from which the flow enters a larger

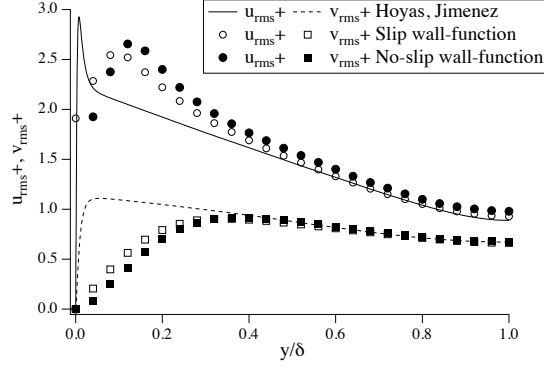


Fig. 11 Turbulent channel, dimensionless velocity fluctuation profiles. Comparison between the analytical profile, DNS data [8] and LES results, obtained with a second-order Lax-Wendroff scheme, using wall functions in slip- and no-slip formulation. Case of $Re_b = 200000$.

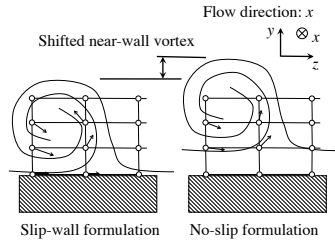


Fig. 12 Sketch of the effect of shifted near-wall vortical structures comparing slip- and no-slip formulations.

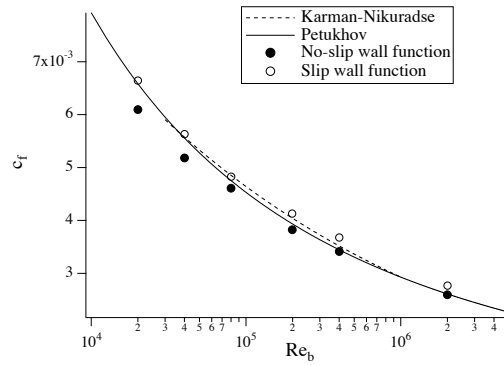


Fig. 13 Wall friction coefficient C_f as a function of the Reynolds number Re_b based on the bulk velocity in the channel. Comparison of slip- and no-slip results with correlations of Kármán and Nikuradse [10] as well as Petukhov [15].

tube of diameter $2D$ (see figure 14). This corresponds to the experiment of Dellenback et al. [4] from which experimental data is available. The mesh is composed entirely of hexaedral elements with 10 cells across the diameter of the upstream tube, which

results in a first off-wall grid point situated at approximately 160 wall units. The mean velocity profile from experimental data is imposed at the inlet. The resulting flow has a Reynolds number of 30 000 and transitions naturally to a turbulent state after the step. The degree of physical detail in this simulation is clearly insufficient for an accurate representation of the flow phenomenon at hand, but in this case, this is not the intent. Instead, this geometry, in conjunction with the very coarse grid resolution, is typical of certain geometrical details in very large LES cases, which often include small-scale jets that are emitted by tubes or conduits into a larger reservoir. Examples are dilution holes in combustion chambers or the narrow passage around the valves of an internal combustion engine, which are often meshed quite coarsely. It is typically in this kind of configuration that the corner problem leads to undesired modifications of the flow field or to numerical artefacts.

Qualitative differences between the wall-law formulation can be observed on the iso-contours of mean axial velocity shown in figure 15. The flow field remains totally unaffected (figure 15, top) for slip wall functions in their non-conservative form, i.e. without correction of wall-normal mass flux (see section 3.4, figure 7). Note that the absence of this correction leads to an unphysical mass flux through the wall downstream of the step that amounts to approx. 15 % of the global mass flux. On the other hand, a clear distortion at the height of the step can be observed when the mass-flux correction is applied. This correction reduces the slip velocity at the corner points and leads to an unphysical acceleration of the flow in the center (figure 15, center). Furthermore, this very localized modification of the flow field causes numerical point-to-point oscillations. The said distortion is not observed for wall functions in the no-slip formulation (figure 15, bottom). A more quantitative view of the problem is presented in figure 16, which shows the normalized, mean axial velocity on the centerline in direct vicinity of the step ($x = -0.5 D$ to $x = D$) compared to experimental data [4]. As the flow is virtually incompressible, one would expect the centerline velocity to remain constant in this area, which is confirmed by the experiment. The simulation results of the slip wall function, however, show a clearly unphysical acceleration. The result using no-slip wall functions is a clear improvement as the centerline velocity remains globally constant despite a slightly oscillatory behavior at the coordinate of the step.

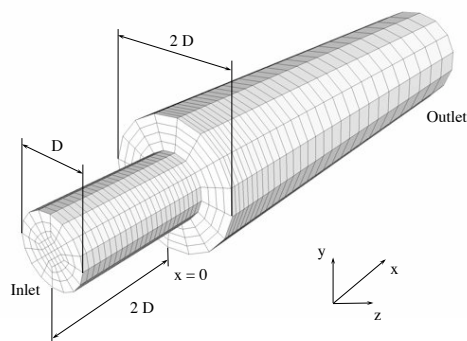


Fig. 14 Flow over a sudden expansion: Mesh and geometry overview.

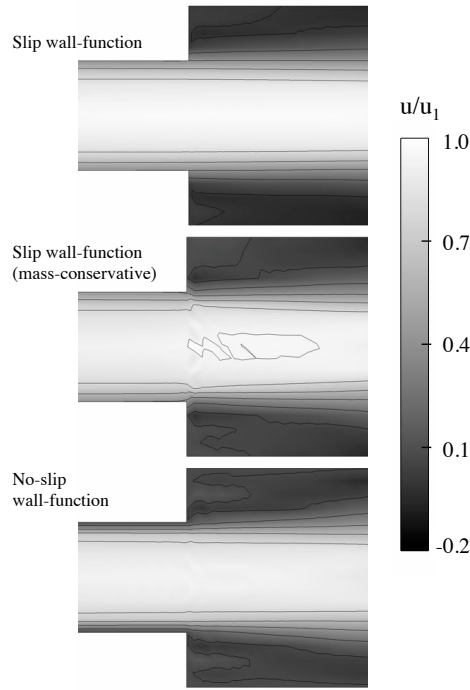


Fig. 15 Mean axial velocity iso-contours of the flow over a sudden expansion. Top: slip wall function without correction (not mass-conservative). Center: slip wall function with correction. Bottom: no-slip wall function.

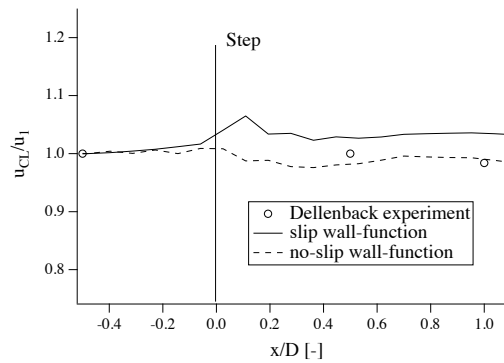


Fig. 16 Flow over a sudden expansion: Ratio of centerline velocities u_{CL} and the centerline velocity at $x = -0.5 D$, u_1 , for slip- and no-slip wall functions compared to experimental data (Dellenback et al. [4]). The diagram shows time-averaged results.

4.3 Injector for aero-engines

The last application is an academical combustion chamber with one single premixing swirler like it is typically found in the latest generation of aero-engine combustors

(figure 17). It is an example for one of the more complex geometries encountered in LES. The swirler is characterized by three stages, each composed of a series of narrow channels separated by the guide vanes, as highlighted in the right part of figure 17. Here, it is operated in a purely aerodynamic regime (without liquid fuel injection or combustion) in order to assess the capability of the novel wall-model implementation. The chamber is pressurized at 4.3 bar, the air fed into the plenum is pre-heated to 473 K, which corresponds roughly to the operating conditions of an engine at partial load. The airflow from the plenum to the chamber is split between the three-staged swirler and a cooling film placed near the circumference of the chamber upstream wall. Owing to the complexity of the computational domain, the grid is composed of tetraedral elements in its volume and of one single layer of prismatic elements at the boundary where wall functions are applied (see section 3.6 for details on the necessity of this method). This approach is applicable in arbitrary geometries as it simply consists in extruding the triangular tessellation of the domain boundary towards the inside. However, the more prismatic layers one chooses to apply or the thicker the layers are, the more the prisms tend to be distorted on sharp edges or corners. A view of the mesh and a detail of the prismatic layer is shown in figure 18. The thickness of the prism layer is varied locally and carefully adapted to be as close as possible to 100 wall units. The resulting mesh comprises approximately 8.5 million cells and 1.6 million nodes. The simulations were performed using the second-order accurate Lax-Wendroff scheme [12]. In the two simulations compared below, the only difference is the wall treatment. Everything else remains the same (mesh, algorithms, timestep).

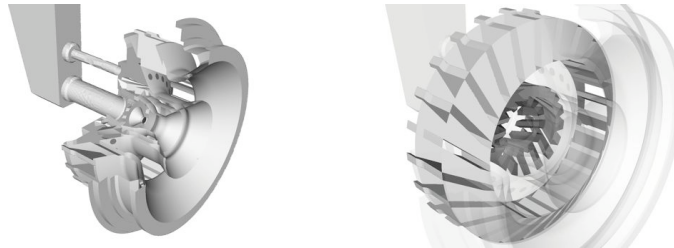


Fig. 17 Left: cut-away view of the injector. Right: transparent view with swirler stages highlighted.

Quantitative results are presented in the form of mean velocity profiles (figure 20) and RMS velocity profiles (figure 21). In both figures, the axial and tangential components obtained with both wall function formulations are compared to experimental data provided by ONERA Fauga-Mauzac. The profiles are extracted over three transverse lines positioned at 10, 15 and 30 mm downstream of the swirler exit (see figure 19). The agreement of the no-slip results in axial direction with experimental data is excellent, both the position and the magnitude of the peaks corresponding to the central flow and the cooling films are accurately reproduced. This is observed on all three measurement positions. The results of the slip wall functions are less satisfying because the peaks of the main flow are shifted slightly towards the center, indicating that the opening angle of the cone-shaped flow is too small. Purely qualitatively, this discrepancy in opening angle can also be observed on the instantaneous velocity field, shown in figure 19. As a consequence, the peak magnitudes increase, a behavior that

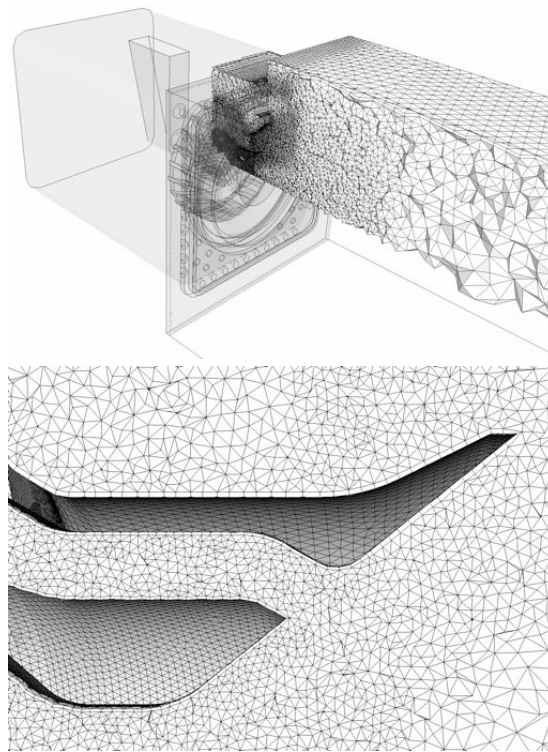


Fig. 18 Mesh overview and detail of hybrid wall boundary region with a layer of prismatic elements.

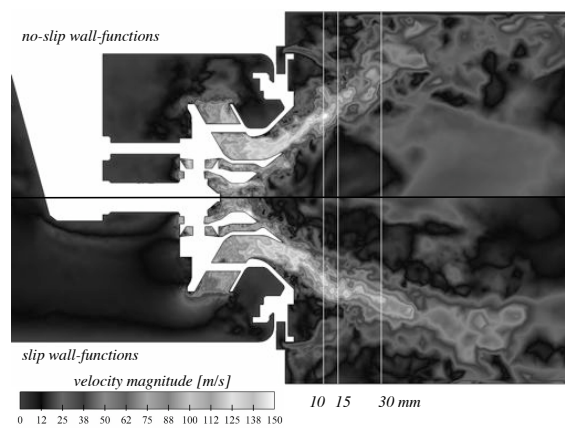


Fig. 19 Instantaneous velocity magnitude contours on a central cross-section through the domain. Upper half: result obtained using no-slip wall functions. Lower half: result obtained using slip wall function. White lines: positions of the extraction of velocity profiles.

is observed consistently at all three positions. In the tangential direction, the same observations can be made: very good agreement for the no-slip formulation and an over-estimation of tangential velocity peaks due to a under-estimated opening of the main flow.

Differences are less pronounced for the axial velocity fluctuations shown in figure 21.

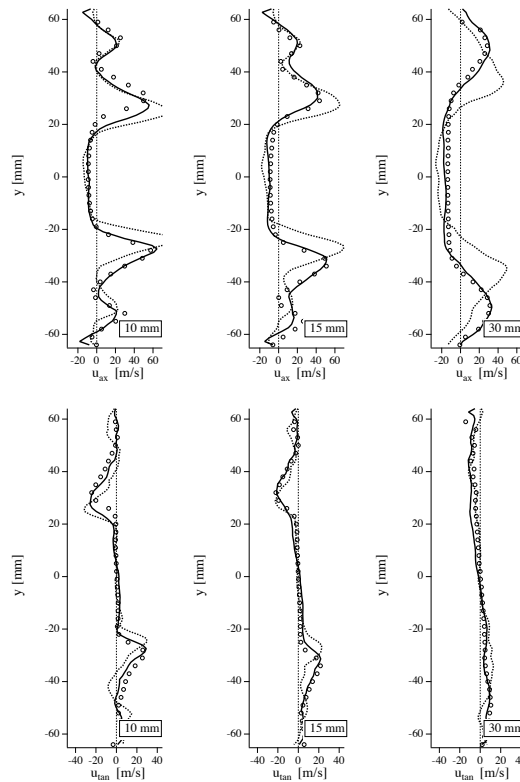


Fig. 20 Mean velocity profiles. Axial component (upper diagram) and tangential component (lower diagram). Comparison of no-slip wall functions (—), slip wall functions (- - -) and experimental data (o o o).

Here, the magnitude of the strongest fluctuations in the turbulent shear layer between the main flow and the central recirculation zone is well captured in both simulations. Differences are observed on the third measurement line at 30 mm, where the offset of the peaks from the slip wall function results becomes most noticeable. In tangential direction, fluctuations are slightly over-estimated on the first measurement line (10 mm) in both simulations. Downstream, the agreement is better for the no-slip results, while the slip wall functions again show over-estimated peaks displaced towards the inside.

The quality of both LES (without considering the differences resulting from wall modeling) is very satisfying as shown by the results obtained using the no-slip wall function approach. With all other simulation parameters (mesh, numerical scheme, turbulence model etc.) being identical, the discrepancies observed relative to the slip wall function

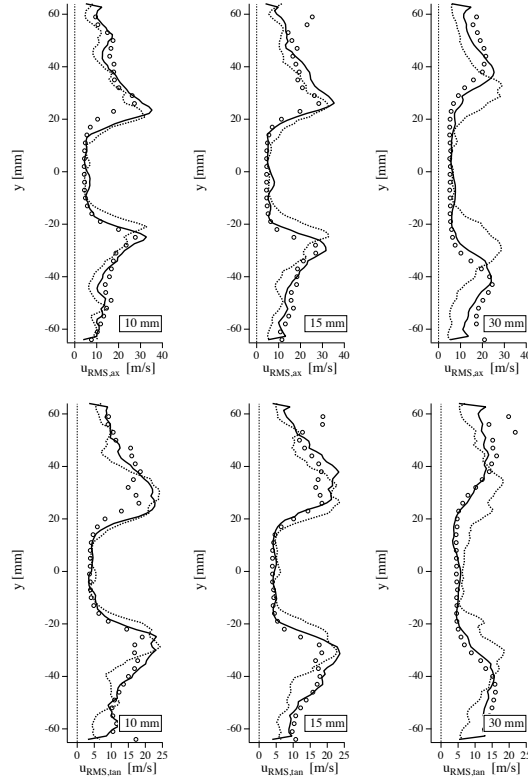


Fig. 21 Velocity fluctuation profiles. Axial component (upper diagram) and tangential component (lower diagram). Comparison of no-slip wall functions (—), slip wall functions (- - -) and experimental data (o o o).

formulation show that the *implementation* of the wall model alone can lead to significantly different results in a realistic application. Here, the reason for the differences is not attributed to the corner problem described in sections 3.4 and 4.2 but to the tendency of the slip velocity (which forces the near-wall momentum in wall-parallel direction) to keep the flow closely attached to curved geometrical features. In this case, the main flow concentrates along the shape of the inner lip of the injector cone, which results in a more confined shape of the overall flow.

Note that the favourable behaviour of the no-slip formulation should not be confounded with the capability to predict boundary layer detachment, which remains out of reach for a wall-model that neglects the streamwise pressure gradient. However, even with a suitable underlying wall-model, the slip-wall formulation still cannot be expected to predict detachment correctly. This is because the near-wall momentum is transported to a non-negligible extent by the slip velocity, which is necessarily aligned with the wall and in its magnitude depends mainly on the level of subgrid scale viscosity μ_{sgs} , as highlighted by equations 25 and 26. This means that the onset of the detachment (a vanishing slip-velocity) would be piloted by the LES subgrid-scale turbulence model – a clearly non-physical mechanism.

Another important aspect is the numerical robustness of either approach. An instruc-

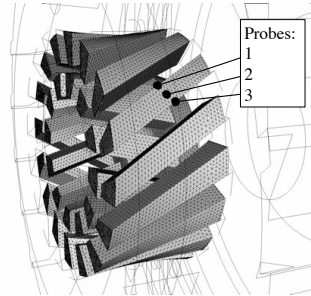


Fig. 22 Location of the pressure probes. View of the two innermost swirler stages.

tive way of looking at this issue is to observe the temporal evolution of pressure and slip velocity at a set of probes located on the wall of a narrow channel. The arrangement of the three probes considered is shown in figure 22. The evolution of the slip velocity x-component, presented in figure 23 reveals its very unstable behavior. While it is observed in the turbulent channel flow that the slip-velocity accommodates to the natural near-wall fluctuations to a certain extent (see fig. 11), it becomes clear that in the case of a less resolved and less regular mesh, the slip-velocity reveals a non-physical strong oscillatory tendency up to the point of briefly taking counterstreamwise orientations. The resulting pressure fluctuations are five times stronger than in the case of the no-slip formulation, as shown in figure 24. Obviously, this would become an issue if the LES was used for aeroacoustics simulations, where wall functions in slip-formulation create a non-physical noise. Furthermore, the advantages of the no-slip formulation in terms of a problem-free (i.e. more robust at locations that are prone to destabilizing the numerics) application by the end-user and the gained rapidity in setting up a simulation should not be under-estimated.

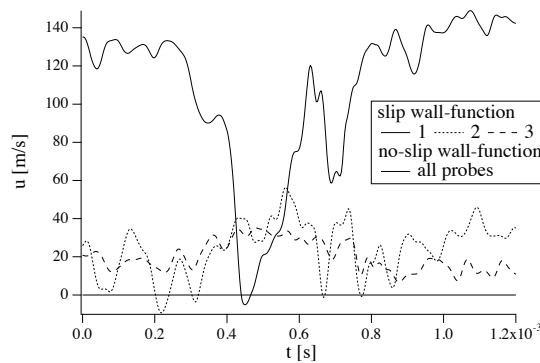


Fig. 23 x-component of the velocity recorded at the three probes over a period of 1.2 milliseconds. Comparison of results from slip- and no-slip wall functions.

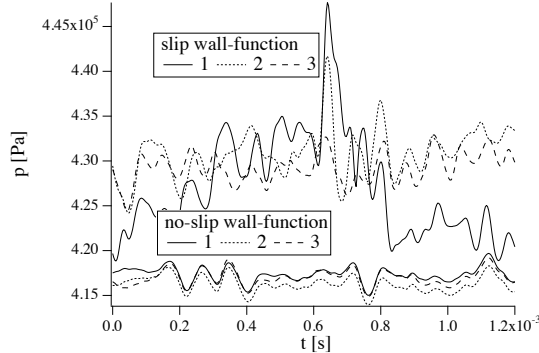


Fig. 24 Pressure signal recorded at the three probes over a period of 1.2 milliseconds. Comparison of results from slip- and no-slip wall functions.

5 Conclusion

Two different implementation methods of wall functions in cell-vertex type solvers have been laid out. The classical method imposes the shear-stress from the wall model directly at the boundary, which results in a slip-velocity at the wall itself. The artificial nature of this slip-velocity and its negative consequences on certain configurations encountered in real-world LES applications has been highlighted. To avoid these difficulties, a formulation with a no-slip condition at the wall is proposed. The wall shear-stress is applied at the first off-wall node, which leads to the necessity of using hexaedral or prismatic meshes in near-wall regions.

Both formulations are compared in three different test cases. The first is the turbulent, periodic channel flow, which allows to verify the capability of both approaches to reproduce the quantities given by theory and DNS data. The second is the flow over a sudden expansion, which reveals the problems created by the slip wall functions at corner points and shows that the no-slip formulation is not affected. The third case is an injector for aero-engines that is typical of complex geometries in realistic applications.

It is shown that the proposed no-slip formulation has superior qualities in reproducing the experimental velocity profiles, which is explained by the increased tendency of the slip wall functions to force the flow into wall-parallel direction along curved surfaces, resulting in a slightly altered flow topology. Furthermore, the tendency to oscillatory behaviour of the slip-velocity in certain cases and its impact on numerical robustness is highlighted.

It can be stated that in realistic applications, the way a wall-model is implemented in a given code and the way it interacts with the numerical methods used (in particular: scheme and SGS turbulence model) *can* influence the results as much as the wall-model itself. While the present work uses a very basic model, the performance of the proposed no-slip formulation in conjunction with more sophisticated models should be further investigated.

Acknowledgements The authors greatly acknowledge the support of ONERA Fauga-Mauzac center in providing measurement data. The support of F. Jaegle by the European community through a Marie Curie Fellowship (contract MEST-CT-2005-020426) is gratefully acknowledged.

References

1. Baggett JS, Jimenez J, Kravchenko AG (1997) Resolution requirements in large-eddy simulations of shear flows. Center for Turbulence Research Annual Research Briefs pp 51–66
2. Cabrit O, Nicoud F (2009) Direct simulations for wall modeling of multicomponent reacting compressible turbulent flows. *Phys. Fluids* 21(055108)
3. Deardorff J (1970) A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. Fluid Mech.* 41:453–480
4. Dellenback P, Metzger D, Neitzel G (1988) Measurement in turbulent swirling flows through an abrupt axisymmetric expansion. *AIAA J.* 13(4):669–681
5. Grötzbach (1987) Direct numerical and large eddy simulation of turbulent channel flows. In: Cheremisinoff NP (ed) *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, Gulf, West Orange, NJ, pp 1337–1391
6. Hirsch C (1988) *Numerical Computation of internal and external flows*. John Wiley, New York
7. Hoffmann G, Benocci C (1995) Approximate wall boundary conditions for large eddy simulations. In: R B (ed) *Advances in turbulence V*, Kluwer Academic Publishers, pp 222–228
8. Hoyas S, Jiménez J (2006) Scaling of the velocity fluctuations in turbulent channels up to $re=2003$. *Phys. Fluids* 18:011,702
9. von Kármán T (1930) Mechanische aehnlichkeit und turbulenz. *Nach Ges Wiss Göttingen, Math Phys Klasse* 1:58–76
10. Kays W, Crawford M, Weigand B (2004) *Convective heat and mass transfer*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math
11. Mohammadi B, Puigt G (2006) Wall functions in computational fluid mechanics. *Comput. Fluids* 35(10):1108–1115
12. Ni RH (1982) A multiple grid scheme for solving the euler equations. *AIAA J.* 20:1565–1571
13. Nicoud F, Ducros F (1999) Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion* 62(3):183–200
14. Nicoud F, Baggett J, Moin P, Cabot W (2001) Les wall-modeling based on optimal control theory. *Phys. Fluids* 13(10):1629–1632
15. Petukhov B (1970) Heat transfer and friction in turbulent pipe flow with variable physical properties. *Advances in heat transfer* 6:503–564
16. Piomelli U, Balaras E (2002) Wall-layer models for large-eddy simulations. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 34(1):349–374
17. Piomelli U, Balaras E, Pasinato H, Squires K, Spalart P (2003) The inner–outer layer interface in large-eddy simulations with wall-layer models. *Int. J. Heat Fluid Flow* 24(4):538–550
18. Poinso T, Lele S (1992) Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* 101(1):104–129
19. Prandtl L (1925) Bericht über untersuchungen zur ausgebildeten turbulenz. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik* 5:136 – 139

20. Schmitt P, Poinso T, Schuermans B, Geigle K (2007) Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high pressure burner. *J. Fluid Mech.* 570:17–46
21. Schumann U (1975) Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. Comput. Phys.* 18:376–404
22. Smagorinsky J (1963) General circulation experiments with the primitive equations: 1. the basic experiment. *Monthly Weather Review* 91:99–164
23. Spalart P (2009) Detached-eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 41:181–202
24. Spalart P, Jou W, Strelets M, Allmaras S (1997) Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach. *Advances in DNS/LES* 1
25. Tannehill J, Anderson D, Pletcher R (1997) *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Hemisphere Publishing Corporation

Résumé

Modélisation des flux pariétaux sur les tuyères des moteurs à propergol solide

Les tuyères des moteurs à propergol solide sont soumises à des flux pariétaux intenses. Pour assurer l'intégrité des composants, les composites carbone/carbone sont alors retenus. Outre leurs excellentes propriétés thermo-mécaniques, ces matériaux sont exposés au phénomène d'ablation : réaction chimique hétérogène de surface entre le matériau et les espèces oxydantes de l'écoulement. D'une certaine façon, cette spécificité protège la structure car elle permet de réduire considérablement le flux de chaleur transmis à la tuyère. En contrepartie, le phénomène doit être parfaitement contrôlé car il s'accompagne d'une récession de la surface. La prédiction des flux pariétaux de masse, de quantité de mouvement, et de chaleur, est donc un point crucial pour la conception des tuyères.

Dans ces circonstances, la simulation numérique fait maintenant partie des outils de conception incontournables pour la mise au point de nouvelles tuyères. Néanmoins, au vu de la puissance des calculateurs disponibles à ce jour, l'emploi de modèles de paroi est une étape nécessaire pour la simulation de ces écoulements à l'échelle 1. Afin de progresser dans cette problématique, on présente une série de simulations numériques directes dont l'analyse permet d'élaborer de nouvelles lois de paroi intégrant plusieurs phénomènes physiques complexes qui modifient le comportement "classique" de la couche limite turbulente : dilatabilité de l'écoulement, influence de l'aspect multi-espèces réactif du fluide, nombre de Prandtl non unité, transfert radiatif, gradient de pression longitudinal, et ablation des parois. La mise en oeuvre de ces modèles est dès à présent envisageable.

Mots-clés : couche limite turbulente, modèle de paroi, aérothermochimie, ablation, écoulement compressible réactif multi-espèces, DNS, LES, RANS.

Abstract

Wall modeling of the flow inside solid rocket motor nozzles

The nozzles of solid rocket motors must resist to severe wall fluxes. Carbon/carbon composite materials are then chosen to insure the structure integrity. In spite of their excellent thermo-mechanical properties, these materials are exposed to the ablation phenomenon: chemical oxidation of the solid material by the combustion products. On the one hand, this feature protects the nozzle structure since this process considerably reduces the wall heat flux. On the other hand, the ablation process must be perfectly controlled because of the geometrical changes induced by the surface recession. The assessment of mass/momentum/heat fluxes at the wall is thus a crucial part for the nozzle design.

With this framework, numerical simulations are nowadays commonly used for designing new nozzles. However, considering the power of the available computers, the use of wall models is a necessary step to simulate full scale devices. To progress in the use of this numerical strategy, one presents a set of direct numerical simulations whose analysis allows to derive new wall functions integrating several complex physical aspects that modify the "classical" behavior of the turbulent boundary layer: multicomponent reacting compressible flow, with non-unity Prandtl number, radiative transfer, streamwise pressure gradient, and wall ablation. These new models are now ready to be tested on realistic configurations.

Keywords: turbulent boundary layer, wall model, aérothermochemistry, ablation, multicomponent reacting compressible flow, DNS, LES, RANS.

Discipline : mathématiques et modélisation, application à la mécanique des fluides.

Laboratoire d'accueil : CERFACS, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse, France.