



 $\rm NGUY \tilde{\hat{E}} N$ Minh Quân

Simulation numérique des interactions fluides-polymères dans le cadre d'une turbulence homogène isotrope

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique UMR CNRS 5509, EC Lyon - UCB Lyon1 - INSA Lyon



 N^o d'ordre NNT : 2016LYSEC26

THÈSE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

opérée au sein de l'École centrale de Lyon

École Doctorat 162 Mécanique, Énergétique, Génie civil, Acoustique

Spécialité de doctorat : Mécanique des fluides

Soutenue publiquement le 09/09/2016, par : $\mathbf{NGUY} \mathbf{\hat{\hat{E}}N}$ Minh Quân

Simulation numérique des interactions fluides-polymères dans le cadre d'une turbulence homogène isotrope

Devant le jury composé de :

Francisco Chinesta	Professeur	GeM-EC Nantes	Président
Yves Dubief	Associate Professeur	University of Vermont	Rapporteur
Gilmar Mompean	Professeur	LML-Université de Lille	Rapporteur
Stefano BERTI	Maître de conférence	LML-Université de Lille	Examinateur
Wouter Bos	Chercheur CNRS	LMFA-EC Lyon	Examinateur
Mahmoud EL HAJEM	Maître de conférence	LMFA- INSA Lyon	Examinateur
Serge Simoëns	Directeur de recherches CNRS	LMFA-EC Lyon	Directeur de thèse
Alexandre DELACHE	Maître de conférence	LMFA- Université Jean-Monnet	Co-directeur de thèse

Résumé

Dans cette thèse, des simulations numériques directes (DNS) de fluides non Newtoniens (basées sur le modèle rhéologique FENE-P) ont été réalisées et comparées avec des DNS de fluides Newtoniens à même viscosité. Les comparaisons sont effectuées sur les statistiques dans l'espace physique et également dans l'espace spectral. Le résultat le plus remarquable est l'émergence d'une nouvelle loi de puissance avec l'exposant -6 pour l'évolution du spectre d'énergie cinétique, dans la zone dissipative. Nous constatons que dans cette région, il y a une injection d'énergie qui provient des polymères et est transférée au fluide porteur, qui est généralement négligée ou inobservable dans les autres travaux de la littérature. Cette injection d'énergie est responsable de cette nouvelle loi de puissance. Nous avons établi un bilan d'énergie échelle par échelle et une estimation approximative des quantités d'énergie échangée qui confirme ce mécanisme.

Liste des symboles

Abbreviations

(en)	Abbreviations en Anglais
(fr)	Abbreviations en Français
THI	Turbulence homogène isotrope (fr)
HIT	Homogeneous isotrope turbulence (en)
EIT	Elasto inertial turbulence (en)
ET	Elastic turbulence(en)
DNS	Direct numerical simulation (en)
DR	Drag reduction (en)
TF	Transformé de Fourier (fr)
FFT	Fast Fourier Transform (en)
FENE	Finite Extension Non linear Elastic (en)
PDF	Probability density function (en)
InV	Incrément de vitesse (fr)
InVL	Incrément de vitesse longitudinale (fr)
InVT	Incrément de vitesse transversale (fr)
SFR	Square root formulation (en)
N	ombre adimensionnelle
Re	Nombre de Reynolds
Re_U	Nombre de Reynolds nominal appliqué aux écoulements spé- cifiques avec des définitions spécifiques au l'écoulement
Re_{λ}	Nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor : $Re_{\lambda} = \frac{u_{rms\lambda}}{\nu_f}$
De	Nombre de Deborah
Wi	Nombre de Weissenberg

Wi_{\Box}	Nombre de Weissenberg calculé au échelle \Box : $Wi_{\Box} = \frac{\tau_p}{\tau_{\Box}}$	
Les angle	es	
θ	Angle entre 2 liaison covalence lié à un même atome Car- bone	[rad]
φ	Angle de rotation d'une liaison covalence	[rad]
Expo	sants des lois de puissance	
α_1	Exposant de la variation de la partie potentielle de la fonction $\Phi_{ij}(k)$	[-]
δ	Exposant de la fonction de densité de probabilité $\varphi(x)$ quand x tend vers ∞	[-]
g	Exposant de la fonction de densité de probabilité $\varphi(x)$ quand x tend vers 0	[-]
Grande	eurs physiques macroscopiques	
u	Vecteur vitesse Eulérienne	$[ms^{-1}]$
\mathbf{u}'	Vecteur vitesse Eulérienne fluctuant	$[ms^{-1}]$
u_i	i-ième composant du vecteur ${f u}$	$[ms^{-1}]$
δu	Incrément de vitesse suivant une direction donné	$[ms^{-1}]$
v	Vecteur vitesse Lagrangienne	$[ms^{-1}]$
v_i	i-ième composant du vecteur ${\bf v}$	$[ms^{-1}]$
w	Vecteur vorticité Eulérienne	$[s^{-1}]$
w_i	i-ième composant du vecteur \boldsymbol{w}	$[s^{-1}]$
t	Temps	[s]
t_{\Box}	Temps caractéristique associé à l'échelle de longueur \Box	[s]
t^{\star}	Temps de décorrélation	[s]
t^R	Temps de retournement	[s]
U	Vitesse caractéristique	$[ms^{-1}]$
U_{η}	Vitesse caractéristique à l'échelle Kolmogorov	$[ms^{-1}]$
l	Longueur caractéristique	[m]
L	Longueur caractéristique à grand échelle	[m]
L_K	Échelle intégrale de turbulence	[m]
L_p	Échelle intégrale de polymère	[m]
λ	Échelle de Taylor	[m]
η	Échelle de Kolmogorov	[m]
l_{DG}	Échelle de De Gennes	[m]

l_{Lum}	Échelle de Lumley	[m]
u_{rms}	Moyenne quadratique de la vitesse	$[ms^{-1}]$
Р	Pression	$[kg.m^{-1}.s^{-2}]$
p	Pression normalisé par la densité : $p = \frac{P}{\rho}$	$[m^2.s^{-2}]$
f	Force volumique (normalisé par la densité)	$[m.s^{-2}]$
$oldsymbol{f}_{ABC}$	Force volumique (normalisé par la densité) que la for- çage ABC injecté dans l'écoulement	$[m.s^{-2}]$
\boldsymbol{k}	Vecteur d'onde	$[m^{-1}]$
f_0	Amplitude de forçage(normalisé par la densité)	$[m.s^{-2}]$
k, k'	Nombre d'onde	$[m^{-1}]$
κ	Un variable modale générique, peut aussi représente nombre d'onde	r un
k_F	Nombre d'onde où on injecte l'énergie de forçage	$[m^{-1}]$
\boldsymbol{A}	La compensé de la symétrisation du terme $\mathbf{u}\cdot \nabla C$	[-]
B	Racine carré symétrie du tenseur de conformation ${old C}$	[-]
$oldsymbol{B}'$	Partie fluctuant du tenseur \boldsymbol{B}	[-]
D	Tenseur de conformation	$[m^2]$
D^{\star}	L'état l'équilibre du tenseur de conformation	$[m^2]$
C	Tenseur de conformation normalisé	[-]
C^{\star}	L'état l'équilibre du tenseur de conformation normalisé	[-]
$oldsymbol{S}$	Contraint qui agit sur une volume fluide	$[m^2.s^{-2}]$
$oldsymbol{S}_p$	Contraint créé par des polymères agissant sur une volume fluide	$[m^2.s^{-2}]$
$oldsymbol{S}_f$	Contraint visqueuse agissant sur une volume fluide	$[m^2.s^{-2}]$
A_{ij}	Notation indicielle de tenseur \boldsymbol{A}	[-]
B_{ij}	Notation indicielle de tenseur \boldsymbol{B}	[-]
B'_{ij}	Notation indicielle de tenseur B'	[-]
C_{ij}	Notation indicielle de tenseur C	[-]
D_{ij}	Notation indicielle de tenseur D	[-]
S_{ij}	Notation indicielle de tenseur \boldsymbol{S}	$[m^2.s^{-2}]$
$(S_p)_{ij}$	Notation indicielle de tenseur \boldsymbol{S}_p	$[m^2.s^{-2}]$
$(S_f)_{ij}$	Notation indicielle de tenseur \boldsymbol{S}_f	$[m^2.s^{-2}]$
Γ	Taux de cisaillement	$[s^{-1}]$

$E_K(k)$	Spectre 1D d'énergie cinétique turbulence	$[m^3.s^{-2}]$
$E_K^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D d'énergie cinétique turbulence	$[m^5.s^{-2}]$
$E_p(k)$	Spectre 1D d'énergie élastique de polymère	$[m^3.s^{-2}]$
$E_p^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D d'énergie élastique de polymère	$[m^3.s^{-2}]$
$\Phi^{m k}$	La fonction de densité d'énergie spectrale de	$[m^3.s^{-2}]$
$S_{f \to p}(k)$	Spectre 1D de l'échange d'énergie du fluide vers le polymère	$[m^3.s^{-3}]$
$S_{f o p}^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de l'échange d'énergie du fluide vers le polymère	$[m^5.s^{-3}]$
$S_{p \to f}(k)$	Spectre 1D de l'échange d'énergie du polymère vers le fluide	$[m^3.s^{-3}]$
$S_{p \to f}^{\boldsymbol{k}}$	Spectre 3D de l'échange d'énergie du polymère vers le fluide	$[m^5.s^{-3}]$
$T_s(k)$	Spectre 1D de l'échange d'énergie entre polymère et le fluide	$[m^3.s^{-3}]$
$T_s^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de l'échange d'énergie entre polymère et le fluide	$[m^5.s^{-3}]$
$T_f(k)$	Spectre 1D de transfert d'énergie cinétique par convection	$[m^3.s^{-3}]$
$T_f^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de transfert d'énergie cinétique par convection	$[m^5.s^{-3}]$
$T_p(k)$	Spectre 1D de transfert d'énergie élastique par advec- tion	$[m^3.s^{-3}]$
$T_p^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de transfert d'énergie élastique par advec- tion	$[m^3.s^{-3}]$
$D_f(k)$	Spectre 1D de la dissipation visqueuse	$[m^3.s^{-3}]$
$D_f^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de la dissipation visqueuse	$[m^5.s^{-3}]$
$R_p(k)$	Spectre 1D de la relaxation d'énergie de polymère	$[m^3.s^{-3}]$
$R_p^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de la relaxation d'énergie de polymère	$[m^5.s^{-3}]$
F(k)	Spectre 1D de l'injection d'énergie au l'écoulement par le forçage	$[m^3.s^{-3}]$
$_F oldsymbol{k}$	pectre 3D de l'injection d'énergie au l'écoulement par le forçage	$[m^5.s^{-3}]$
$D_a(k)$	Spectre 1D de la dissipation artificielle	$[m^3.s^{-3}]$
$D_a^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de la dissipation artificielle	$[m^5.s^{-3}]$

$T_a(k)$	Spectre 1D de la transfert artificielle par l'effet de symétrisation de tenseur \boldsymbol{B}	$[m^3.s^{-3}]$
$T_a^{oldsymbol{k}}$	Spectre 3D de la transfert artificielle par l'effet de symétrisation de tenseur ${\pmb B}$	$[m^5.s^{-3}]$
$\Pi^T(k)$	Flux cumulé d'un spectre quelconque $T(k):\Pi^T(k)=\int_0^k T(k')dk'$	$[m^4.s^{-3}]$
$t_f(k, p, q)$	Transfert élémentaire nombre d'onde par nombre d'onde de $T_f^{\mbox{\boldmath k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
$t_f^{(3D)}(oldsymbol{k},oldsymbol{p},$	$oldsymbol{q}$) Transfert élémentaire mode par mode de $T_f^{oldsymbol{k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
$t_p(k, p, q)$	Transfert élémentaire nombre d'onde par nombre d'onde de $T_p^{\mbox{\boldmath k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
$t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})$	$oldsymbol{q}$) Transfert élémentaire mode par mode de $T_p^{oldsymbol{k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
$t_a(k, p, q)$	Transfert élémentaire nombre d'onde par nombre d'onde de $T_a^{\mbox{\boldmath k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
$t_a^{(3D)}(oldsymbol{k},oldsymbol{p},$	$oldsymbol{q}$) Transfert élémentaire mode par mode de $T_a^{oldsymbol{k}}$	$[m^5.s^{-3}]$
SM	Second membre dans l'équation dynamique de l'écou- lement porteur	$[m^3.s^{-3}]$
SMP	Second membre dans l'équation dynamique de polymère	$[m^3.s^{-3}]$
e_K	Énergie cinétique turbulence moyenne sur une unité de volume	$[m^2 s^{-2}]$
e_p	Énergie élastique de polymère moyenne sur une unité de volume	$[m^2.s^{-2}]$
e_p^F	Contribution de la partie fluctuant au énergie élastique de polymère moyenne e_p	$[m^2.s^{-2}]$
e_p^M	Contribution de la partie moyenne au énergie élastique de polymère moyenne e_p	$[m^2.s^{-2}]$
Q_f	Estimation de l'énergie de polymère qui est injecté au fluide : $Q_f = (e_p^M)^2 + 6e_p^M e_p^F + 3(e_p^F)^2$.	$[m^2.s^{-2}]$
$e_{f \to p}$	Énergie cinétique turbulence converti au énergie élas- tique de polymère (moyenne sur une unité de volume)	$[m^2.s^{-2}]$
$e_{p \to f}$	Énergie élastique de polymère converti au énergie ci- nétique turbulence (moyenne sur une unité de vo- lume)	$[m^2.s^{-2}]$
ϵ_{f}	Dissipation visqueuse moyenne sur une unité de volume	$[m^2.s^{-3}]$
$\phi_{ij}(oldsymbol{r})$	Fonction corrélation de vitesse : $\phi_{ij} = \langle u_i(\boldsymbol{x})u_j(\mathbf{u}+\boldsymbol{r})\rangle$	$[m^2 s^{-2}]$
$\phi(oldsymbol{r})$	La trace du tenseur ϕ_{ij}	$[m^2 s^{-2}]$

$\phi^p_{ijkl}(m{r})$	Fonction corrélation de polymère : $\phi_{ijkl}^p = \langle B_{ij}(\boldsymbol{x}) B_{kl}(\mathbf{u} + \boldsymbol{r}) \rangle$	$[m^2 s^{-2}]$
$f(oldsymbol{r})$	Fonction corrélation longitudinale . La notation f peut être également utilisé pour présenté une fonction scalaire quelconque	
$g(oldsymbol{r})$	Fonction corrélation transversale	[-]
\mathbf{Sy}	mboles, constructions, et fonctions mathématiques	
	Un objet mathématique quelconque	
X	Représente un objet mathématique quelconque	
ε_{ijk}	Symbol de Levi-Civita	
Ι	Matrice identité	
δ_{ij}	Symbol delta de Kronecker	
$\delta(*)$	Fonction delta de Dirac	
$\delta_r(*)$	Fonction delta de Dirac translaté une distance de r	
$III_r(*)$	Fonction peigne de Dirac avec l'espacement de r	
<u>i</u>	Unité imaginaire	
${\cal P}$	Fonction de Peterlin	
D	Nombre de dimension considérée	[-]
\mathcal{D}	Domaine de calcul	
B_{L_b}	Boîte périodique de L_b	
$V_{\mathcal{D}}$	Volume total du domaine de calcul	$[m^3]$
e _x	Vecteur unitaire suivant 1ère direction (direction parallèle au écoulement dans un canal)	
e_y	Vecteur unitaire suivant 2ème direction (1ère direction perpendiculaire au écoulement dans un canal)	
e_z	Vecteur unitaire suivant 3ème direction (2ème direction perpendiculaire au écoulement dans un canal)	
\perp	Direction perpendiculaire à la direction de cisaillement	
	Direction parallèle à la direction de cisaillement	
x	Coordonnée suivant direction $\mathbf{e}_{\mathbf{x}}$, la notation x peut être éga- lement utilisé pour présenter l'abscisse d'une fonction à une seule variable quelconque	
y	Coordonnée suivant direction $\mathbf{e}_{\mathbf{y}}$, la notation y peut être éga- lement utilisé pour présenter l'ordonnée d'une fonction à une seule variable quelconque	

z	Coordonnée suivant direction $\mathbf{e}_{\mathbf{z}}$	
x	Vecteur de position d'un point	[m]
X	Vecteur de position d'un centre de masse d'un groupe de mo- nomères	[m]
x_i	i-ième composant du vecteur \boldsymbol{x}	[m]
r	Vecteur de séparation entre 2 points. Cette notation est éga- lement utilisé pour indiquer la séparation entre 2 extrémités d'un groupe de monomères dans un molécule de polymère	[<i>m</i>]
r_i	i-ième composant du vecteur \boldsymbol{r}	[m]
n	Vecteur entière	
n	Nombre entière. Cette notation est également utilisé pour compter le nombre de polymère dans une unité de volume.	
t_{ij}	Notation indicielle d'une tenseur d'ordre 2 quelconque	
t_{ijkl}	Notation indicielle d'une tenseur d'ordre 4 quelconque	
f, f_1, f_2	Des fonctions scalaires quelconques	
$f_d(\Box)$	Une fonction scalaire discrète quelconque	
f_n	n-ième élément dans la suite créé par la discrétisation de la fonction f	
H(f)	Une opération que lconque ${\cal H}$ appliqué au fonction f	
L(f)	Une opération linéaire que l conque ${\cal H}$ appliqué au fonction f	
N(f)	Une opération non linéaire quelconque H appliqué au fonction f	
C_1, C_2	Des constants quelconques	
$P_{ij}(\boldsymbol{r})$	Un projection parallèle à $m{r}$	
$\Pi_{ij}(oldsymbol{r})$	Un projection perpendiculaire à \boldsymbol{r}	
A(t)	Variable aléatoire qui varie en temps	
$\mathcal{L}()$	Combinaison linéaire de tout les opérants	
$\mathbf{P}_C\{\Box\}$	Projecteur de Craya	
L_b	Longueur de la boîte périodique	[m]
Δt	Le pas du temps dans un schéma numérique ou un dis- tance en temps	[s]
$ heta_N$	La partition d'interpolation explicite de terme non linéaire	[s]
$ heta_N$	La partition d'interpolation explicite de terme linéaire	[s]
Ens	sembles mathématiques	

 \mathbb{R} Nombres réels

\mathbb{C}	Nombres complexes
\mathbb{N}	Nombres des entiers naturelles
\mathbb{Z}	Nombres des entiers relatives
S_k	Ensemble des modes dans l'espace de Fourier qui satisfont : $k < {\pmb k} < k+1$
G_{t_f}	Ensemble des interactions triadiques $t_f^{(3D)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})}$ qui satisfont : $\boldsymbol{k} \in S_k, \boldsymbol{p} \in S_p$, et $\boldsymbol{q} \in S_q$
G_{t_p}	Ensemble des interactions triadiques $t_p^{(3D)(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q})}$ qui satisfont : $\boldsymbol{k} \in S_k, \boldsymbol{p} \in S_p$, et $\boldsymbol{q} \in S_q$
Opé	rations mathématiques
$tr(\Box)$	Trace de tenseur \Box
$d\Box$	Opération différentielle
$D\square$	Opération différentielle particulaire
$\partial \Box$	Opération différentielle partielle
$\partial_{\perp} \Box$	Opération différentielle partielle en espace suivant la direction perpendiculaire au direction de cisaillement
$\partial_{\parallel} \Box$	Opération différentielle partielle en espace suivant la direction parallèle au direction de cisaillement
$\Delta \Box$	Opération Laplacienne de \Box
$\nabla \Box$	Opération gradient de \Box
$ abla \cdot \Box$	Opération divergence de \Box
$\nabla \wedge \Box$	Opération rotation de \Box
$\Box \cdot \Box$	Produit à simple contraction (Exemple : $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_i$)
\Box : \Box	Produit à double contraction (Exemple : $\mathbf{A} : \mathbf{B} = A_{ij} B_{ij}$)
$\Box \land \Box$	Produit vectorielle (Exemple : $\mathbf{u} \wedge \mathbf{v} = u_i v_j \varepsilon_{ijk}$)
	Produit de convolution
$(\dot{\Box})$	Dérivation partielle en temps de \ast
$\langle \Box \rangle$	Moyenne de \Box
$\left< \Box \right>_V$	Moyenne de \Box sur la volume V
$\left< \Box \right>_t$	Moyenne de \Box en temps (la dépendant en temps disparaîtra)
$\langle \Box angle_{oldsymbol{x}}$	Moyenne de \Box en espace (la dépendant en espace disparaîtra)
$TF[\Box]^{m k}$	Transformé de Fourier de * avec une nouvelle dépendance en vecteur d'onde \boldsymbol{k} (Utilisé quand \Box est encombrant)

$FFT[\Box]^{m k}$	Transformé de Fourier rapide de * avec une nouvelle dépendance en vecteur d'onde ${\pmb k}$	en-
$\widetilde{\Box}^{m k}$	Transformé de Fourier de * avec la nouvelle dépendance vecteur d'onde ${\pmb k}$	en
$\widehat{\Box}^{m k}$	Transformation de * au coefficient de la série de Fourier, av une nouvelle dépendance en vecteur d'onde \boldsymbol{k}	rec
	Valeur absolu du scalaire \Box	
□	Norme du vecteur ou tenseur \Box	
$\Re(\Box)$	La partie réel de nombre complexe \Box	
$Max(\Box)$	Le maximum de \Box	
Paramèt	cres et constants physiques	
K	Raideur d'un ressort	$[kg.s^{-2}]$
K_p	Coefficient de linéarité entre l'énergie élastique et la trace de la tenseur de conformation	$[m^2.s^{-2}]$
K_G	Raideur d'un ressort Gaussien	$[kg.s^{-2}]$
K_{FENE}	Raideur d'un ressort FENE	$[kg.s^{-2}]$
Ν	Nombre de monomères dans un polymère. Cette notation pe être également utilisé pour désigner un nombre entière art trairement grand	ut [-] bi-
N'	Nombre de monomères dans un groupe de monomère	[-]
М	Nombre de groupes de monomères	[-]
L_{max}	Distance bout à bout maximale d'une molécule de polymène normalisé par la distance à équilibre R_0	ere [m]
ρ	Densité volumique	$[kg.m^{-3}]$
μ	Viscosité dynamique [k	$g.m^{-1}.s^{-1}]$
ν	Viscosité cinématique	$[m^2 s^{-1}]$
$ u_f$	Viscosité cinématique de solvant (Newtonienne)	$[m^2.s^{-1}]$
$ u_{tot}$	Viscosité cinématique à cisaillement nulle de solution non Newtonienne	$[m^2.s^{-1}]$
$ u_p$	La contribution de polymère au ν_{tot} : $\nu_p + \nu_f = \nu_{tot}$	$[m^2.s^{-1}]$
$ u_0$	L'asymptote à cisaillement nulle de la mesure de viscosité d'une solution	$[m^2.s^{-1}]$
$ u_{\infty}$	L'asymptote à cisaillement infini de la mesure de viscosité d'une solution	$[m^2.s^{-1}]$
u'	Viscosité apparent d'une solution non Newtonienne me- suré par un rhéomètre à un taux de cisaillement donné	$[m^2.s^{-1}]$

$ u_a$	Viscosité artificielle ajouté dans l'équation dynamique $[m^2$ de polymère	$s^{-1}]$
С	Concentration de polymère dans une unité de volume [mol.n	$n^{-3}]$
c^{\star}	Concentration critique de polymère où les polymères [mol.n commencent à s'interpénétrer	$n^{-3}]$
m	La masse	[kg]
ζ	Coefficient de frottement hydraulique autour d'une $[kg, sphère]$	$[s^{-1}]$
au	Temps de relaxation ou un temps caractéristique	[s]
$ au_p$	Temps de relaxation de polymère	[s]
8	Ratio entre la viscosité de polymère et viscosité de fluide : $s=\frac{\nu_p}{\nu_f}$	[-]
β	Ratio entre la viscosité de fluide et viscosité de solution non Newtonienne : $\beta = \frac{\nu_f}{\nu_p + \nu_f}$	[-]
Gran	deurs statistiques	
μ_n	Moment statistique d'ordre n	
$\varphi_P(\Box)$	fonction de densité de probabilité normalisé	[-]
$F(\Box)$	Flatness : coefficient d'aplatissement	[-]
$M(\Box)$	Fonction génératrice des moments	[-]
$P(\Box)$	fonction de densité de probabilité	[-]

- $S(\Box)$ Skewness
- $Var(\Box)$ Variance

Grandeurs thermodynamique et les grandeurs physiques microscopiques

[-]

k_B	Constant de Boltzmann	$[kg.m^2.s^{-2}.K^{-1}]$
Т	Température	[K]
γ_{ij}	Corrélation de direction entre le i-ième monomère (o de monomère) et le j-ième monomère (ou groupe d mère) : $\gamma_{ij} = \langle r^{(i)} r^{(j)} \rangle$	u groupe [-] le mono-
a _G	Vecteur aléatoire Gaussien	[-]
a	La taille d'un monomère	[m]
F	Une force microscopique quelconque	$[kg.m.s^{-2}]$
\mathbf{F}_{op}	Une force exercé par un opérateur	$[kg.m.s^{-2}]$
$\Delta \epsilon$	Différence de niveau d'énergie entre la configura- tion gauche et trans	$[kg.m^2.s^{-2}]$

ΔE	Différence de niveau d'énergie entre la configura-	$[ka.m^2.s^{-2}]$
	tion la plus énergétique et celui la moins énergé- tique dans une liaison covalence	[
\mathbf{R}	Vecteur qui lie les 2 extrémités d'un molécule de polym	nère $[m]$
R	La distance entre 2 extrémités d'un molécule de polyn $R= {\bf R} $	mère : $[m]$
R_0	Moyenne quadratique de la distance bout à bout R à libre	l'équi- $[m]$
R_F	Rayon de Flory	[m]
R_{max}	Distance bout à bout maximale d'une molécule de poly	vmère $[m]$
R_{\star}	Intensité normalisé de la force Brownienne	[m]
r	Vecteur qui lie les 2 extrémités d'un monomère ou un g de monomère de polymère	groupe $[m]$
R_{\perp}	Projection du vecteur \mathbf{R} suivant la direction perpendiculaire au direction de cisaillement	[m]
R_{\parallel}	Projection du vecteur \mathbf{R} suivant la direction parallèle au direction de cisaillement	[m]
$S(\Box)$	Entropie associé au macro état \Box [k]	$g.m^2.s^{-2}.K^{-1}]$
$\Omega(\Box)$	Nombre de micro-états possibles associé au macro-état	□ [-]
U	Énergie interne	$[kg.m^2.s^{-2}]$
W	Énergie mécanique	$[kg.m^2.s^{-2}]$
Q	Énergie thermique	$[kg.m^2.s^{-2}]$
X	La position de la centre de masse d'un monomère ou groupe de monomères	[m]
\mathbf{F}_D	La force hydraulique appliqué sur un monomère ou un groupe de monomères	$[kg.m.s^{-2}]$
W	Processus de Wiener	[-]
σ_B	Variance de la force Brownienne	$[kg.m.s^{-2}]$
\mathbf{F}_B	La force Brownienne	$[kg.m.s^{-2}]$
\mathbf{F}_{R}	La force de rappelle	$[kg.m.s^{-2}]$

Table des matières

1 Introduction

Tur	bulenc	e newtonienne	25
2.1	Introd	luction	26
2.2	Équat	ion de comportement	26
	2.2.1	Vision Lagrangienne et vision Eulérienne	26
	2.2.2	Équations de Navier-Stokes	26
	2.2.3	Les grandeurs adimensionnelles	28
	2.2.4	L'énergie cinétique	28
2.3	L'anal	lyse statistique	29
	2.3.1	Approche statistique	29
	2.3.2	Homogénéité	31
	2.3.3	Isotropie avec symétrie miroir	31
	2.3.4	Stationnarité	32
	2.3.5	Ergodicité	33
	2.3.6	Décomposition de Reynolds - Statistiques en 1 point	33
	2.3.7	Corrélation spatiale - Statistiques en plusieurs points	34
	2.3.8	Suivi de particules	36
2.4	Analy	se de Fourier	36
	2.4.1	Rappel sur la transformation de Fourier	36
	2.4.2	La transformée de Fourier appliquée à la turbulence :	38
	2.4.3	Modélisation d'une THI par une boîte périodique	38
	2.4.4	Équation de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier	40
	2.4.5	Spectre d'énergie cinétique	43
2.5	Phéno	ménologie	44
	2.5.1	Injection d'énergie et échelle intégrale	44
	2.5.2	Théorie d'équilibre de Kolmogorov	45
2.6	Conclu	usion	46
Dyr	namiqu	ie des polymères	47
3.1	Introd	luction	48
3.2	Propri	iété générale d'un polymère	48
	3.2.1	Propriété chimique d'un polymère	48
	Tur 2.1 2.2 2.3 2.4 2.5 2.6 Dyn 3.1 3.2	Turbulend 2.1 Introd 2.2 Équat $2.2.1$ $2.2.1$ $2.2.2$ $2.3.3$ $2.2.4$ $2.3.1$ $2.3.1$ $2.3.2$ $2.3.3$ $2.3.4$ $2.3.5$ $2.3.6$ $2.3.7$ $2.3.8$ 2.4 Analy $2.4.1$ $2.4.2$ $2.4.3$ $2.4.4$ $2.4.2$ $2.4.3$ $2.4.4$ $2.4.5$ 2.5 Phéno $2.5.1$ $2.5.2$ 2.6 Conclustor Dynamiqu 3.1 3.1 Introd 3.2 Propring $3.2.1$ $3.2.1$	Turbulence newtonienne 2.1 Introduction 2.2 Équation de comportement 2.2.1 Vision Lagrangienne et vision Eulérienne 2.2.2 Équations de Navier-Stokes 2.2.3 Les grandeurs adimensionnelles 2.2.4 L'énergie cinétique 2.3 L'analyse statistique 2.3.1 Approche statistique 2.3.2 Homogénétité 2.3.3 Isotropie avec symétrie miroir 2.3.4 Stationnarité 2.3.5 Ergodicité 2.3.6 Décomposition de Reynolds - Statistiques en 1 point 2.3.7 Corrélation spatiale - Statistiques en plusieurs points 2.3.8 Suivi de particules 2.4 Analyse de Fourier 2.4.1 Rappel sur la transformation de Fourier 2.4.2 La transformée de Fourier appliquée à la turbulence : 2.4.3 Modélisation d'une THI par une boîte périodique 2.4.4 Équation de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier 2.5.2 Théorie d'énergie et échelle intégrale 2.5.2 Théorie d'équilibre de Kolmogorov 2.5.2 Théorie d'équilibre de Kolmogorov<

 $\mathbf{22}$

		3.2.2	Conformation et flexibilité	50
	3.3	Modél	lisation d'un polymère par une chaîne idéale	54
		3.3.1	Marche aléatoire et distribution Gaussienne	54
		3.3.2	Amélioration du modèle	55
		3.3.3	Entropie et loi de Hooke du polymère	57
		3.3.4	Chaîne Gaussienne et chaîne FENE	58
	3.4	Intera	ction polymère-polymère	60
	3.5	Modèl	le microscopique du polymère dans un écoulement	60
		3.5.1	Modèle de Langevin pour une particule	61
		3.5.2	Modèle de FENE-M et Rousse pour un polymère	62
		3.5.3	L'effort créé par le polymère	64
			3.5.3.1 Modèle d'haltères ou Dumbell model	65
			3.5.3.2 Signification physique des paramètres des modèles	
			d'haltères	66
			3.5.3.3 Conclusion	67
	3.6	Modèl	les macroscopiques du polymère dans un écoulement	67
		3.6.1	Équation gouvernant la dynamique du fluide porteur	67
		3.6.2	Tenseur de conformation	68
		3.6.3	Équation gouvernant la dynamique des polymères : modèle	
			Oldroyd-B et FENE-P	69
		3.6.4	Adimensionnement et formulation du modèle	71
		3.6.5	Formulation générale	72
		3.6.6	Bilan d'énergie	73
		3.6.7	Signification physique des paramètres	74
	3.7	Intera	ction polymères-turbulence	77
	3.8	Conch	usion	78
4	Mét	thode	numérique	79
	4.1	Introd	luction	80
	4.2	Choix	de méthode	80
	4.3	Métho	ode pseudo-spectrale	81
		4.3.1	La discrétisation	81
		4.3.2	Transformation de Fourier Discrète (DTF)	84
			4.3.2.1 Méthode de Galerkin	84
			4.3.2.2 Méthode des points de collocation	85
			4.3.2.3 Relation entre méthode de collocation et les séries	
			de fourier : l'aliasing	86
		4.3.3	Aliasing dans une produit de convolution	87
		4.3.4	Oscillations de Gibbs	89
		4.3.5	Application à un modèle 3D	90
		4.3.6	Parallélisation	92
		4.3.7	Équation de Navier-Stokes	92
	4.4	Équat	ion dynamique du polymère	92
		4.4.1	Formulation classique	92
		4.4.2	Formulation par décomposition en racine carré (square root	
			formulation [3]) \ldots	93

	4.5	Avancement en temps	. 94
		4.5.1 Schéma implicite et schéma explicite	. 94
		4.5.2 Schéma avec une étape	. 95
		4.5.3 Schéma multi-étape : Adams-Bashforth	. 97
		4.5.4 Stabilité numérique des schémas	. 97
	4.6	Initialisation	. 98
		4.6.1 Initialisation du champs de vitesse fluide	. 98
		4.6.2 Initialisation du champs de conformation	. 98
	4.7	Validation	. 99
		4.7.1 Écoulement de Kolmogorov	. 99
		4.7.2 Écoulement cellulaire	. 100
	4.8	Conclusion	. 104
5	Din	nensionnement et statistique	105
	5.1	Introduction	106
	5.2	Les paramètres et configurations des simulations	. 106
		5.2.1 Les choix des paramètres	. 106
		5.2.2 Choix de configuration	. 107
	5.3	Les échelles caractéristiques et les grandeurs notables	. 109
	5.4	Analyse statistique appliquée au fluide Newtonien	. 112
		5.4.1 Temps de cohérence	. 112
		5.4.2 Vérification de l'isotropie	. 113
		5.4.3 L'effet du forçage	. 115
		5.4.4 L'effet du nombre de Reynolds	. 119
	5.5	Analyse statistique appliquée au fluide Non Newtonienne	. 121
		5.5.1 Vérification de l'isotropie	. 121
		5.5.2 Comparaisons entre Newtonien et Non Newtonien	. 121
	5.6	Extension des polymères	. 124
	5.7	Étirement global des polymères par le fluide	. 125
	5.8	Influence des polymères sur la dissipation et la réduction de traînée	128
	5.9	Conclusion	. 130
6	Tra	nsfert d'énergie échelle par échelle	131
	6.1	Introduction	132
	6.2	Analyse échelle par échelle	. 132
		6.2.1 Énergie spectrale pour le champ de vitesse	. 132
		6.2.2 Décomposition en racine carrée du tenseur de conformation	
		et énergie spectrale pour l'énergie élastique	. 133
		6.2.3 Dimensionnement	. 136
	6.3	Bilan de transfert d'énergie échelle par échelle	. 139
		6.3.1 Equation de Lin	. 139
		6.3.2 Transfert entre énergie cinétique et énergie élastique	. 141
		6.3.3 Nouveaux mécanismes de cascade d'énergie	. 144
	6.4	Bilan de transfert d'énergie mode par mode : interaction triadique .	146
		6.4.1 Transfert d'énergie cinétique par advection : cas Newtonien .	. 146
		6.4.1.1 Concept de diagramme KPQ	. 146

			6.4.1.2 Propriété du terme $t_f(k, p, q)$	149
			6.4.1.3 Analyse de diagramme KPQ	150
		6.4.2	Transfert d'énergie cinétique par advection : cas non New-	
			tonien	152
		6.4.3	Transfert d'énergie élastique par advection	152
			6.4.3.1 Propriété du terme $t_p(k, p, q)$	154
			6.4.3.2 Analyse de diagramme KPQ	156
		6.4.4	Échange d'énergie entre turbulence et polymère	156
			6.4.4.1 Propriété du terme $s_{p \to f}(k, p, q)$ et $s_{f \to p}(k, p, q)$.	157
			6.4.4.2 Echange du polymère vers le fluide $s_{p \to f}$	157
			6.4.4.3 Echange du fluide vers le polymère $s_{f \to p}$	159
			6.4.4.4 Nature des échanges du fluide et du polymère	159
		6.4.5	Transfert $T_a(k)$	159
6	5.5	Conclu	usion	162
7 (Con	clusio	ns	163
7	7.1	Plus d	le détail sur la square root formulation	168
7	7.2	Démo	nstration : transfert d'énergie entre polymère et fluide	169
7	7.3	Démo	nstration : $\sum_{k \in \mathbb{Z}} T_a(k) = 0$	170
7	7.4	Foncti	on Dirac	171
7	7.5	Figure	e PDF de l'incrément de vitesse	171
Bib	liog	graphie	e	181

Table des figures

2.1	Corrélation longtudinale $f(r) = \langle u_1(x).u_1(x+r) \rangle$ et corrélation transversale $g(r) = \langle u_2(x).u_2(x+r) \rangle$	35
3.1	Polymère de polyéthylène obtenu par polymérisation de N mono- mères d'éthylène. Le zoom permet d'identifier la répétition des mo- nomères	40
3.2	Différents branchements typiques des polymères pour des liaisons Carbone-Carbone	49 50
3.3	Conformation de la molécule d'éthane. a) Molécule d'éthane. b) Vue 3D. c) Vue suivant l'axe de liaison $C1 - C2$. d) Evolution du potentiel énergétique moléculaire en fonction de l'angle de rotation	00
3.4	φ , résultat de la simulation du logiciel libre Ghemical[1] Example de conformation d'un polymère. a)Vue 3D et torson φ du polymère autour de l'axe C1-C2. b) Variation d'énergie potentielle moléculaire en fontion de l'ange de torsion φ (Résultat de simulations par le logiciel Ghemical[1]). c) Zoom sur la liaison C1-C2, en différentes conformations principales. d)Projection Newman. e) Schéma d'une partie de la chaîne de carbone du squelette du poly-	52
3.5	éthylène Schéma du squelette du polymère modélisé par une marche aléatoire	53
3.6	(voir la notation dans le texte)	54
3.7	Schéma illustrant la modélisation d'un polymère par une chaîne Gaussienne constituée des ressorts entropiques : a) polymère, b) subdivision en $M = 10$ sous groupe de monomères, c) remplacement	00
3.8	des sous groupes par des ressorts entropiques	59
3.0	entre 2 régimes et c) semi-dilués	60 61
3.10	Schéma illustrant les différentes forces exercées sur un sous-groupe de monomères (voir texte ci-dessous pour l'expliquation des termes)	63

3.11 3.12	 Schéma illustrant les différentes forces pour le modèle d'haltères (voir texte ci-dessous pour les expliquations des termes) Schémas illustrant la réprésentation du tenseur de conformation D sous forme ellipsoïde) Les images des polymères sont tirées de Roi- 	65
3.13	ter et al [64]	69 75
4.1 4.2 4.3 4.4	Illustration des oscillations de Gibbs	89 90 91
4.5	de la méthode numérique	100
4.6	de conformation $tr(\mathbf{S})$ à t=10,70 et 140 s	102 103
5.1	Correlations temporelles des différents cas (trait continu) en fonc- tion du temps normalisé t/t^R . Le trait discontinu vertical indique le	
5.2	temps de décorrelation normalisé t^*/t^R . Comparaison des 4 fonctions $\frac{r}{2} \frac{\partial f_y(r)}{\partial r}$ (blue line), $\frac{r}{2} \frac{\partial f_z(r)}{\partial r}$ (green line), $g_y(r)$ (red line) et $g_z(r)$ (cyan line) de cas (a1)-figure a et cas (b1)-	113
5.3	figure b Comparaisons des PDFs des 3 composantes de vitesse suivant 3 directions Cartésiennes $\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0$ et \mathbf{z}_0 pour : cas al-figure a, cas bl-	114
5.4	figure b, cas c1-figure c, cas c3-figure d	116 117
5.5	Comparaisons des PDFs des IVs transversale : forcing vs déclin : 4 cas présenté : (a)- cas a1, (b)- cas b1, (c)- cas c1, (d)- cas c3	118
5.6	Comparaisons des skewness et flatness des InV transversale et longi- tudinale : (a)- skewness pour InV longitudinale, (b)- skewness pour InV transversale , (c)- flatness pour InV longitudinale, (d)- flatness pour InV transcerves	110
5.7	pour my transervsale . Comparaison des PDFs des 3 composantes de vitesse suivant x,y,z	119
5.8	Comparaison des PDFs de l'incrément de vitesse longitudinale entre le cas à faible Reynolds $Re_{\lambda} \simeq 30$ (figure (a)) et cas à haut Reynolds	120
5.9	$Re_{\lambda} \simeq 100$ (figure (b))	120
	$Re_{\lambda} \simeq 100$ (figure (b)	121

) Comparaison des 4 fonctions $\frac{r}{2} \frac{\partial f_y(r)}{\partial r}$ (blue line), $\frac{r}{2} \frac{\partial f_z(r)}{\partial r}$ (green line),	
	$g_y(r)$ (red line) et $g_z(r)$ (cyan line) de cas Newtonien (a1)-figure a et	100
5.1	cas Non Newtonien (a2)-ingure D	122
0.1.	pour la fluida Nontonianna (cas al figure (a)) et cas fluida non	
	pour le fuide Newtonienne (cas al- figure (a)) et cas fiuide non Newtonion (cas a2 figure (b))	199
5 14	Comparaison des PDF des incrément transversaux de vitesse pour	122
0.17	différentes valeurs de $\frac{r}{r}$ (a)-un cas Newtonien (cas a1) et (b)-un cas	
	non Newtonien (cas a ^{η})	123
5.13	3 Comparaison des PDF des incrément de la vitesse longitudinale	
	pour différentes valeurs de $\frac{r}{\eta}$ (a)-un cas Newtonien (cas a1) et (b)-un	
	$cas non Newtonien (cas a2) \dots \dots$	123
5.1_{-}	4 Comparaisons de skewness et flatness des IV transversale et longi-	
	tudinale : (a)- skewness pour IV longitudinale, (b)- skewness pour	
	IV transversale, (c)- flatness pour IV longitudinale, (d)- flatness	
F 11	pour IV transervsale	124
5.1	Comparaison entre PDF d'extension des polymeres pour differentes	105
5 14	Cas	125
0.10 5 1'	7 Dépendence de l'étimement des polymères ou nombre de Weissenberg	120
5.19	A Dépendance de l'ethément des polymeres au nombre de weissenberg	120
0.10	conditions initiales	129
		120
6.1	C_{answer} is a set of $1/2$ set of $1/2$ set of E_{answer} is the set of E_{answer}	
0.1	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normanise (par les	
0.1	variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti-	
0.12	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait continue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133
6.2	comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133
6.2	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait continue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135
6.26.3	comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135
6.26.3	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135
6.2 6.3	comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135 138
6.2 6.3	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135 138
6.26.36.4	comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge) Spectre d'énergie élastique (non normalisé) des polymères pour tous les cas Spectres normalisés : la normalisation est choisie telle que les spectres devraient se superposer si notre arguement sur le dimen- sionnement qui conduit à l'expression (6.14) et (6.25) est correct. Q_f est definie dans l'équation (6.26) et $Q_p = A (Wi_n)^2 - \langle B_{ij} \rangle^2$. Bilan de : (a) énergie cinétique $E_K(k)$, (b) flux de l'énergie cinétique, (c) énergie élastique et (d) flux de l'énergie élastique en fonction de	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge) Spectre d'énergie élastique (non normalisé) des polymères pour tous les cas Spectres normalisés : la normalisation est choisie telle que les spectres devraient se superposer si notre arguement sur le dimen- sionnement qui conduit à l'expression (6.14) et (6.25) est correct. Q_f est definie dans l'équation (6.26) et $Q_p = A (Wi_n)^2 - \langle B_{ij} \rangle^2$. Bilan de : (a) énergie cinétique $E_K(k)$, (b) flux de l'énergie cinétique, (c) énergie élastique et (d) flux de l'énergie élastique en fonction de $k\eta$. Les graphiques (a) et (c) sont présentés avec l'échelle log-log : les valeurs négatives sont présenté par des traits pointillés, et les valeurs	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'énergie cinétique E_K normalisé (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'énergie cinétique E_K normanise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge) Spectre d'énergie élastique (non normalisé) des polymères pour tous les cas	133 135 138
6.26.36.4	Comparaison du spectre d'énergie cinétique E_K normalisé (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133135138142
 6.2 6.3 6.4 6.5 	Comparaison du spectre d'énergie chietique E_K hormalise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133135138142
 6.2 6.3 6.4 6.5 	Comparaison du spectre d'energie cinetique E_K normanise (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	133135138142
 6.2 6.3 6.4 6.5 	Comparison du spèctre d'énergie cinétique E_K normanisé (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait conti- nue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)	 133 135 138 142 145

6.7 6.8	Diagramme d'interaction KPQ à gauche et coupe à droite avec des illustrations des types de triades possibles pour chaque échelle p et q dans le rectangle d'interaction	149
6.0	fert d'énergie cinétique $t_f(k, p, q)$ basé sur la triade $(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$ dans le cas Newtonien . Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et $-(Max)/50$ (bleu clair).	151
6.9	Diagramme triadique KPQ pour differentes coupes a k fixe du trans- fert d'énergie cinétique $t_f(k, p, q)$ basé sur la triade $(\hat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \hat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \hat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$ dans le cas non-Newtonien . Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et $-(Max)/50$ (bleu clair).	153
6.10	Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du trans- fert d'énergie élastique par advection $t_p(k, p, q)$ basé sur la triade $(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{q})\widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}} : \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}}$. Les iso-contours sont tracés à partir du maxi- mum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune)	
6.11	et $-(Max)/50$ (bleu clair)	155
6.12	mum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et $-(Max)/50$ (bleu clair)	158
	triade $(\mathbf{p} \times \hat{\mathbf{u}}^{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{B}^{\mathbf{q}}) : \mathbf{B}^{\mathbf{r}}$. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et $-(Max)/50$ (bleu clair). Le trait noir verticale à $P = 25$ marque un chagement de signe de transfert, qui est un peu près fixe	
6.13	à tout les échelles	160
	(Max) : (Max)/50 (jaune) et $-(Max)/50$ (bleu clair).	161
7.1 7.2	Incrément de vitesse pour le cas al (Newtonien)	172 173
7.3	Incrément de vitesse pour le cas c1 (Newtonien)	174
7.4	Incrément de vitesse pour le cas a6 (Newtonien)	175
7.5	Incrément de vitesse pour le cas c3 (Newtonien)	176
7.6	Incrément de vitesse pour le cas a2 (Non Newtonien)	177
7.7	Incrément de vitesse pour le cas a3 (Non Newtonien)	178
7.8	Incrément de vitesse pour le cas a4 (Non Newtonien)	179
1.9	Increment de vitesse pour le cas ab (Non Newtonien)	190

Liste des tableaux

5.1	Paramètres principaux des différents cas	109
5.2	Les échelles importantes pour nos cas simulés	111
5.3	Compilation des grandeurs notables des simulations Newtoniennes	
	et Non-Newtoniennes	111

Remerciement

Je tiens à remercier d'abord mes directeurs de thèse, Serge Simöens et Alexandre Delache, qui m'ont beaucoup aidé au niveau scientifique et également m'ont inspirer dans l'art de la vie. Je remercie spécialement Wouter Bos pour ses idées qui jouent un rôle essentielle dans cette thèse et également pour ses précieux conseils. Je remercie Mahmoud El Hajem pour ses aides constants depuis que mon statut d'étudiant de Master jusqu'au jour de ma soutenance. Je voudrais remercier également à tout l'équipe d'enseignement de mécanique des fluides à l'INSA qui m'a donner l'opportunité d'enseigner aux étudiants de GMC et GMD de l'INSA, c'est une expérience unique que j'apprécie toujours. Je remercie également mes collèges de bureau, qui sont également mes proches amis : Donato Vallefuoco, Robert Chahine, Aleksandr Eremin, Shrikant Derebail Muralidhar, Bao Lin Xie, Aurore Loisy, Jorge Morales, ... pour les discussions intéressants sur tous les sujets et les soirées sympathiques. Finalement, je voudrais remercier tout les personnels du laboratoire LMFA, qui ont créé une communauté scientifique extraordinaire et une ambiance très conviviale.

Chapitre

Introduction

L'étude proposée dans le cadre de cette thèse part d'une problématique applicative : étudier les mélanges turbulentes dans une solution de polymères. Ce type de solution se présente dans plusieurs applications industrielles comme le mélange biochimie, les transports des fluides, les lances à incendie, etc... La solution de polymère attira l'attention des chercheurs par la découverte d'un phénomène remarquable en 1948 [76, 81, 82] : l'ajout d'une quantité très faible de polymère dans une écoulement Newtonien peut réduire considérablement la traînée. Depuis sa découverte, beaucoup d'études et de théories ont été faites pour comprendre les mécanismes de cette phénomène (voir résumé dans [89]).

Le première théorie proposée par Lumley [43] en 1969 a expliqué partiellement le mécanisme en focalisant sur l'interaction entre les polymères et la couche limite et en négligeant l'effet des polymères dans les régions loin des parois. Malgré le succès dans l'explication du phénomène de la réduction de traînée [60, 26, 27], les études basées sur ce théorie n'ont pas abouti à un modèle quantitatif et universel.

Une deuxième théorie complémentaire proposée plus tard par De Gennes [72, 22, 21] dans les années 1990 a suggéré que : dans certaines conditions, les polymères (même à faible concentration) peuvent affecter le comportement de la cascade d'énergie turbulente. Cette théorie attira à nouveau l'attention de la communauté scientifique sur ce sujet, avec une nouvelle direction : investiguer l'interaction fluide-polymères dans une turbulence statistiquement homogène et isotrope (THI). Malgré que la nature de la THI ne permet pas de adresser à la question essentielle dans le phénomène de la réduction de traînée (DR), mais comme la THI ne contient pas des complexités induit par l'inhomogénéité et l'anisotropie, elle présente donc des avantages conceptuelle pour bâtir un modèle de comportement universelle de polymère. Plusieurs études ont été réalisés sur la THI [55, 2, 12, 86, 77, 15, 4, 80, 90] mais jusqu'à présent, nous n'avons pas encore abouti à une compréhension complète de l'interaction polymère-fluide.

En dehors du phénomène de la réduction de traînée, plusieurs autres problématiques émergent, notamment le mélange chaotique [33, 34]) ou la dégradation des polymères, qui nécessite encore plus d'investigation sur ce sujet.

A cause de la séparation énorme des échelles entre la taille des polymères jusqu'à celles des plus grandes échelles turbulentes, obtenir des informations précises et détaillées sur les interactions de polymère-fluides reste encore un challenge pour les expérimentateurs ainsi que pour les simulations numériques. En particulier, les difficultés techniques sont sévères dans les expériences : les polymères peuvent se dégrader au cours de l'expérience, la plupart des informations sont dans les échelles microscopiques, et reste inaccessibles avec notre niveau de technologie actuelle. Par contre, la situation semble moins dramatique pour les simulations numériques. L'augmentation de la puissance de calcul disponible donne l'accès à des informations sur une plus large gamme d'échelles et nous aide à avoir une image plus complète des mécanismes de ces interactions.

Malgré ces difficultés, plusieurs études effectuées ont permis d'établir quelques consensus sur certains aspects de l'interaction fluide-polymères :

Une petite quantité de polymères ajoutée dans l'écoulement peut significativement affecter les grandes structure et réduire les activités aux petites échelles (de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov). Ce comportement est confirmé pour la turbulence de parois [60, 26, 27], ou à fort gradient moyenne [79] et en la THI [55, 2, 12, 86].

Les résultats basés sur les simulations de type shell-mode dans une THI [6, 5] montre que le transfert d'énergie globalement s'effectue à partir du fluide vers les polymères. Or, le transfert d'énergie dans le sens inverse est aussi observé [80], particulièrement aux petites échelles. En effet, un mécanisme robuste de la DR est observé [26] : les polymères prennent l'énergie des vortex quand le couple créé par la contrainte des polymères s'oppose à la rotation des vortex [38], et les polymères relaissent une partie de son énergie près de la paroi [26].

D'autres résultats de DNS de l'écoulement à gradient homogène [62] ont été comparés avec les mesures expérimentales en canal et en tuyau [84, 61] et montre que la contrainte de Reynolds moyenne (non présente en THI) et la fluctuation de vitesse perpendiculaire à la paroi est de plus en plus atténuée quand la réduction de traînée augmente.

En THI 2D, Perlekar [35] a montré que les étirement des polymères sont principalement dans les domaines où l'étirement local domine par rapport à la rotation locale, qui est également observé dans un canal 3D [73].

Les études sur la THI à grand nombre de Reynolds est présenté dans les références [77, 15, 4, 80, 90, 2]. En particulier, l'étude de De Angelis et al. [15] a établi un complet bilan d'énergie échelle par échelle de l'interaction entre polymères et fluide.

A partir d'un résultat expérimentale, Xi et al. [90] essaient de modifier la théorie d'équilibre d'énergie De Gennes et Tabor [72, 22, 21] par une théorie d'équilibre des flux par une analyse de transfert d'énergie cinétique.

Une récent contribution est celle de Valente et al.[80], qui, en analysant le flux d'énergie cinétique échelle par échelle dans une THI, ont montré que les polymères prennent de l'énergie des grandes échelles et la réinjectent aux plus petites échelles, où elle est dissipée.

La plupart des résultats sont observés à relativement grand nombre de Reynolds. Un autre régime d'écoulement intéressant est celui où les mélanges chaotiques émergent à très bas Reynolds, mais ceci a été fait pour une grande élasticité (nombre de Weissenberg important). Ce régime est appelé turbulence élastique

(ET) par Groisman et al. [33, 34, 14]. Ce régime est caractérisé par un spectre d'énergie cinétique qui suit une loi de puissance $E_K(k) \sim k^{-\alpha}$ avec $\alpha \simeq 3.5$ (où k est le nombre d'onde spatiale). Cette loi de puissance présente également dans les autres études, comme pour écoulement de Kolmogorov 2D [7] avec $\alpha \simeq 3.8$. Ces exposants sont en accord avec la théorie de Fouxon et al. [31] qui prédisent que $\alpha > 3$. Nous pouvons raisonner ainsi : la turbulence élastique impacte également la zone dissipative, aux échelles où l'inertie est négligeable par rapport aux effets visqueux. En effet, aux nombres de Reynolds plus élevés mais encore faibles, on trouve une coexistence de la turbulence inertielle et de la turbulence élastique dans les études d'écoulements en canal et en tuyaux [67, 25, 74]. Ce régime est appelé turbulence élasto-inertielle (EIT). Ce type d'écoulement est particulier car on le trouve dans 2 cas : lorsque le nombre de Reynolds est sous critique ou lorsqu'il est bien supérieur au nombre de Reynolds critique. La présence de l'EIT au nombre de Reynolds sous critique démontre l'existence d'un flux d'énergie significatif venant des polymères vers le fluide. Le spectre d'énergie cinétique de l'ET [25] suit une loi de puissance avec l'exposant α compris entre 11/3 et 14/3. Dans une turbulence de canal, le spectre d'énergie élastique longitudinale suit une loi de puissance avec l'exposant $\alpha = 14/3$ près de la paroi [75] à grand nombre de Reynolds.

Dans l'étude de THI réalisé par Watanabe et Gotoh [87, 88], l'exposant de la loi de puissance dans le domaine visco-élastique varie légèrement entre 4.1 - 4.6, avec une pente de moins en moins importante quand l'élasticité augmente.

D'autres simulations numériques, pour 3 dimensions (Perlekar et al. [55]) et 2 dimensions (Gupta et al.[35]) montrent un spectre d'énergie cinétique qui contient une région de spectre proportionnelle à k^{-6} (Voir figure 12 dans [55] et figure 2 dans [35]). Cette région contient des échelles plus petites que l'échelle de Kolmogorov, et pour les échelles encore plus petites, on retrouve la loi de puissance $k^{-3.5}$ qui est la signature de la turbulence élastique dans le cas 3D [55]. Ces résultats sont obtenus avec faible élasticité contrairement à l'EIT ou l'ET. Il semble que les petites structures sont déjà activées à très faible élasticité, contrairement au consensus sur le fait que les polymères réduisent l'activité des petites échelles. Même si cette gamme d'échelle contient une quantité négligeable de l'énergie cinétique totale, cela montre clairement l'effet des polymères sur l'écoulement porteur.

Chapitre 2

Turbulence newtonienne

Sommaire

2.1	Intro	oduction	26
2.2	Équa	ation de comportement	26
	2.2.1	Vision Lagrangienne et vision Eulérienne	26
	2.2.2	Équations de Navier-Stokes	26
	2.2.3	Les grandeurs adimensionnelles	28
	2.2.4	L'énergie cinétique	28
2.3	L'an	alyse statistique	29
	2.3.1	Approche statistique	29
	2.3.2	Homogénéité	31
	2.3.3	Isotropie avec symétrie miroir	31
	2.3.4	Stationnarité	32
	2.3.5	Ergodicité	33
	2.3.6	Décomposition de Reynolds - Statistiques en 1 point	33
	2.3.7	Corrélation spatiale - Statistiques en plusieurs points	34
	2.3.8	Suivi de particules	36
2.4	Ana	lyse de Fourier	36
	2.4.1	Rappel sur la transformation de Fourier	36
	2.4.2	La transformée de Fourier appliquée à la turbulence :	38
	2.4.3	Modélisation d'une THI par une boîte périodique	38
	2.4.4	Équation de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier	40
	2.4.5	Spectre d'énergie cinétique	43
2.5	Phéi	noménologie	44
	2.5.1	Injection d'énergie et échelle intégrale	44
	2.5.2	Théorie d'équilibre de Kolmogorov	45
2.6	Con	clusion	46

2.1 Introduction

La turbulence est un régime dynamique désorganisé d'écoulement, qui a lieu quand les effets visqueux deviennent négligeables devant les effets inertiels. Les fluides classiquement considérés sont des fluides Newtoniens, ce sont des fluides qui ont une contrainte interne toujours proportionnelle au taux des déformations. Même si les équations qui gouvernent la dynamique des fluides ont été formulées par Naviers et Stokes en 1822, comprendre la turbulence est encore un challenge de la science moderne.

Après plus de 190 années de recherche, la science a développé des outils d'analyse très pointus qui aident à comprendre les mécanismes d'interaction dans l'écoulement sous-jacent. Ce chapitre présente certaines de ces analyses et des lois phénoménologiques qui peuvent nous aider à faire des analyses similaires en cas de fluides Non-Newtoniens, ce qui est l'objectif de cette thèse.

2.2 Équation de comportement

2.2.1 Vision Lagrangienne et vision Eulérienne

Dans le cadre de la mécanique des fluides, il y a deux représentations de la vitesse d'un fluide qui sont acceptées par la communauté scientifique :

- La représentation Lagrangienne : l'observateur suit une "particule" fluide donnée. Le vecteur vitesse dit Lagrangien \mathbf{v} est une fonction seulement du temps et de la position de la particule en question. On distingue une particule d'une autre grâce à sa position initiale \boldsymbol{x}_0 au temps t_0 . On a alors respectivement la position Lagrangienne et la vitesse Lagrangienne à instant t de cette particule : $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}_0, t_0, t)$ et $\mathbf{v}(\boldsymbol{x}_0, t_0, t)$
- La représentation Eulérienne : l'observateur est fixé dans l'espace et il observe les "particules" fluides qui passe devant lui. La vitesse Eulérienne est donc une fonction du temps et de l'espace : $\mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t)$.

Pour les simulations numériques et pour l'expérience, la description Eulérienne est employée plus fréquemment car elle est plus simple d'accès tant pour l'implémentation que pour une question de coût. Pour simplifier la notation, nous allons par la suite omettre la dépendance de position \boldsymbol{x}^1 et de temps t².

2.2.2 Équations de Navier-Stokes

Afin de faire des simulations de type prédictif, nous cherchons à calculer la variation temporelle de la vitesse (l'accélération). Dans la vision Eulérienne, l'accélération s'écrit :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_1} \frac{dx_1}{dt} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_2} \frac{dx_2}{dt} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_3} \frac{dx_3}{dt}$$
(2.1)

Nous avons pris la convention suivante : $\frac{\partial}{\partial t} \to \partial_t$ et $\frac{\partial}{\partial x_i} \to \partial_i$

^{1.} La dépendance en espace réapparaîtra si la dépendant en espace est différente de \boldsymbol{x}

^{2.} La dépendance en temps réapparaîtra si la dépendant en temps est différente de t

Comme pour la vitesse, nous souhaitons obtenir la coïncidence des accélérations Eulérienne et Lagrangienne. Pour ce faire, nous devons imaginer que les coordonnées Eulériennes suivent la vitesse de la particule, soit :

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i \tag{2.2}$$

Nous avons construit une "dérivée particulaire", que nous notons "D" afin de la distinguer de la dérivée temporelle Lagrangienne que nous notons habituellement "d". L'opérateur "dérivée particulaire" peut être également appliqué à d'autres grandeurs que la vitesse. Nous avons donc identification des opérateurs Lagrangien(L) et Eulérien (E)

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_{L} = \left(\frac{D}{Dt}\right)_{E} = \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_{i}\frac{\partial}{\partial x_{i}}\right)_{E}$$
(2.3)

Pour décrire la dynamique d'un écoulement, on utilise deux équations :

- Le bilan des forces :

$$\frac{D}{Dt}\mathbf{u} = \frac{1}{\rho}\nabla\cdot\mathbf{S} + \boldsymbol{f} \tag{2.4}$$

où **S** est le tenseur des contraintes en un point \boldsymbol{x} et \boldsymbol{f} est une force volumique normalisée par la densité $[m.s^{-2}]$.

— La conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{2.5}$$

où ρ [kg.m⁻³] est la densité du fluide.

Nous considérons dans ce travail l'hypothèse "incompressible". Cela s'applique également aux fluides compressibles dont la vitesse caractéristique est faible par rapport à celle du son : s'il existe une compression forte localement, cette compression va se propager avec la vitesse du son, sur tout le domaine étudié. Le critère d'application de cette condition est que le nombre de Mach (le rapport entre la vitesse caractéristique de l'écoulement et la vitesse du son) soit inférieur à 0,3[41].

Dans le cadre de cette thèse, nous considérons les solutions aqueuses, qui sont des fluides visqueux, incompressibles. Dans ce cas, la densité est constante, l'équation (2.5) devient :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{2.6}$$

Pour un fluide Newtonien et incompressible, la contrainte s'écrit :

$$S_{ij} = -P.\delta_{ij} + \mu(\partial_j u_i + \partial_i u_j) \tag{2.7}$$

où P est la pression [Pa] et μ est la viscosité dynamique [Pa.s].

En combinant l'équation (2.7) avec les équations (2.4) et (2.6), nous obtenons donc l'équation dite de "Navier-Stokes" (1823) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{u} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + \nu_f \Delta \mathbf{u} + \boldsymbol{f}$$
(2.8)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{2.9}$$

où $p \ [m^2.s^{-2}]$ est la pression divisée par la densité du fluide : $p = \frac{P}{\rho}$ et $\nu_f = \frac{\mu}{\rho}^3$ est la viscosité cinématique de fluide $[m^2.s^{-1}]$.

2.2.3 Les grandeurs adimensionnelles

Une particularité de la turbulence est de suivre des lois de similitude : les phénomènes peuvent être caractérisés par les nombres adimensionels qui sont le rapport entre les différentes forces du problème : si les nombres adimensionels sont égaux, les phénomènes sont similaires.

Dans le cas d'un fluide Newtonien, il n'y a que deux mécanismes principaux :

— Les effets visqueux sont modélisés par le terme $\nu_f \Delta \mathbf{u}$ dans l'équation de Navier-Stokes. Par analyse dimensionnelle, ce terme peut être remplacé par une vitesse caractéristique U et une échelle de longueur caractéristique l :

$$\nu_f \Delta \mathbf{u} \sim \nu_f \frac{U}{l^2} \tag{2.10}$$

— Les effets d'inertie peuvent référer à l'effet de transport de la quantité de mouvement $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$. L'analyse dimensionnelle donne :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}_f \sim \frac{U^2}{l} \tag{2.11}$$

Pour comparer ces 2 effets, nous calculons le nombre de Reynolds, qui est le ratio entre l'effet inertiel et l'effet visqueux.

$$Re = \left(\frac{U^2}{l}\right) / \left(\frac{\nu_f U}{l^2}\right) = \frac{Ul}{\nu_f}$$
(2.12)

Un écoulement devient turbulent quand l'effet inertiel domine l'effet visqueux : Re >> 1. Il y a plusieurs façons de choisir l'échelle caractéristique et la vitesse caractéristique. Cela donne différents nombres de Reynolds. On a par exemple :

- Le nombre de Reynolds nominal $Re_U = \frac{UL}{\nu_f}$ où U est la vitesse moyenne de l'écoulement et L est la grande échelle caractéristique du problème. Cette échelle intégrale peut être choisie différemment suivant les configurations, par exemple : nous pouvons choisir L comme étant la taille de maille dans une turbulence générée par une grille.
- Le nombre de Reynolds turbulent $Re_{\lambda} = \frac{u_{rms}\lambda}{\nu_f}$ où u_{rms} est la variance de la fluctuation de vitesse autour de la moyenne U et λ est l'échelle de Taylor qui sera définie plus loin.

2.2.4 L'énergie cinétique

En turbulence, l'énergie qui nous intéresse est l'énergie cinétique des particules fluides. Par contre en mécanique des milieux continus, les grandeurs sont souvent ramenées à une unité de volume, avec l'énergie cinétique associé : $e_k = \rho \frac{1}{2} \mathbf{u}^2$

^{3.} L'indice f est pour distinguer la viscosité du solvant (ν_f) de la viscosité du polymère (ν_p) qui sera introduite dans les chapitres suivants

Pour les fluides incompressibles, les équations sont normalisées par la densité, donc, l'énergie cinétique est plus fréquemment trouvée sous la forme : $e_k = \frac{1}{2} \mathbf{u}^2$

A partir de l'équation de Navier-Stokes, il suffit de multiplier tous les termes avec **u** pour obtenir une équation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) = -\mathbf{u} \cdot \nabla p + \mathbf{u} \cdot \nu_f \Delta \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{f}$$
(2.13)

Chaque terme porte une signification physique :

- $-\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)$ est la variation locale de l'énergie cinétique. $-\mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)$ est le transport de l'énergie cinétique
- $\mathbf{u} \cdot \nabla p$ est le travail de la pression.
- $-\nu_f \mathbf{u} \cdot \Delta \mathbf{u}$ est la dissipation visqueuse. Ce terme peut être décomposé en 2 :

$$\nu_f \mathbf{u} \cdot \Delta \mathbf{u} = u_i \ \nu_f \ \partial_j^2 u_i = \nu_f \ \partial_j^2 (u_i^2) - \nu_f (\partial_j u_i)^2 \tag{2.14}$$

Avec $\nu_f \partial_j^2(u_i^2)$ est la diffusion d'énergie, et $\nu_f (\partial_j u_i)^2$ est la pseudodissipation.

 $- \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}$ est l'injection d'énergie au cours de l'écoulement.

2.3L'analyse statistique

Approche statistique 2.3.1

La turbulence est un phénomène désordonné, traiter la fluctuation de vitesse comme une variable aléatoire et appliquer les outils d'analyse statistique donne beaucoup de résultats intéressants. Les moments statistiques en 1 point d'ordre nautour d'une valeur c sont définis comme ci-dessous :

$$\mu_n(c) = \int_{-\infty}^{+\infty} (x-c)^n p(x) dx$$
 (2.15)

Où x est la valeur possible de la variable aléatoire en question, et p(x) est sa densité de probabilité (d.d.p. ou probability density function (PDF)). On utilise souvent deux valeurs particulières de c:

- -c = 0: moment (brut).
- $c = \langle x \rangle$: moment centré.

Le moment utilisé le plus courant est le moment d'ordre 1, qui est appelé l'espérance. L'espérance peut être approximée par l'opération de moyenne d'après la théorie des grands nombres : si le nombre d'échantillons indépendants est assez grand, la moyenne d'ensemble des échantillons converge presque sûrement vers l'espérance. La notion de convergence presque sûrement est une convergence au sens des probabilités : c'est la probabilité que la convergence tende vers 1 quand le nombre d'échantillons tend vers l'infini. Pour cette raison, l'espérance est souvent confondue avec la moyenne. Dans ce travail, l'espérance et la moyenne sont notées avec $\langle . \rangle$. Les échantillons pris pour calculer la moyenne doivent avoir la même loi de probabilité et ils doivent être statistiquement indépendants. La façon la plus sûre d'effectuer le calcul de l'espérance est de répéter les essais plusieurs fois avec exactement la même condition, il s'agit donc de moyenne des réalisations. Dans certaines conditions, la moyenne des réalisations peut être remplacée par les autres types de moyenne.

Nous rencontrerons dans ce travail également les calculs du moment d'ordre 2, qui est appelé la variance, notée par Var. Ce moment ordre 2 peut être calculé en utilisant le moment d'ordre 1 suivant la formule :

$$Var = \int_{-\infty}^{+\infty} (x-c)^2 p(x) dx \approx \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$
(2.16)

Comme l'énergie est souvent exprimée sous la forme quadratique d'une variable, la variance est souvent liée avec l'énergie d'un processus aléatoire.

Nous utiliserons également les moments normalisés d'ordre 3 (skewness-S) et d'ordre 4 (kurtosis-K) pour caractériser la forme d'une PDF :

$$S = \frac{\langle x - \langle x \rangle \rangle^3}{\langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle^{3/2}}$$
(2.17)

$$K = \frac{\langle x - \langle x \rangle \rangle^4}{\langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle^2}$$
(2.18)

Ces moments sont souvent utilisés pour comparer la forme d'une PDF avec la distribution Gaussienne. Sachant que le skewness et le kurtosis de la distribution Gaussienne vaut respectivement 0 et 3 : plus le skewness d'une PDF est différent de zéro, plus cette PDF est non symétrique. Plus le nombre K-3 est grand, plus la PDF est aplatie : le nombre K-3 est également appelé "flatness". Des analyses plus fines peuvent aller jusqu'aux moments d'ordre 5 (hyper-skewness) et 6 (hyper kurtosis)

La fonction densité de probabilité p est un objet théorique souvent mal connu pour une variable quelconque, mais nous pouvons la reconstruire à partir de ses moments. Pour ce faire, nous introduisons la fonction génératrice des moments ou la fonction caractéristique de la variable aléatoire :

$$M(\kappa) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\kappa x} p(x) dx$$
(2.19)

A partir de la fonction caractéristique, nous pouvons calculer n'importe quel moment d'ordre n :

$$\mu_n = \underline{i}^{-n} \left(\frac{d^n \phi}{d\kappa^n} \right) \tag{2.20}$$

Nous pouvons également reconstruire la fonction caractéristique et donc la loi de distribution de la variable aléatoire à partir de ces moments grâce à l'équation (2.20) et à un développement limité de Taylor :

$$\phi(\kappa) = \mu_0(\kappa_0) + \underline{i}\mu_1(\kappa_0)(\kappa - \kappa_0) + ... + \frac{\underline{i}^n}{n!}\mu_0(\kappa_0)(\kappa - \kappa_0)^n + \circ(\kappa - \kappa_0)^n \quad (2.21)$$

Il y a également des moments conjoints de plusieurs variables aléatoires qui représentent la liaison causale entre plusieurs variables aléatoires.

2.3.2 Homogénéité

Définition : une turbulence est dite homogène (ou plus précisément statistiquement homogène) si toutes les grandeurs statistiques sont invariantes par toute translation.

C'est une condition de simplification très forte, elle implique les résultats suivants :

- Tout les moments statistiques en 1 point sont des constantes. Leur variation spatiale est zéro.
- Tout les moments statistiques en n points sont dépendants de (n-1) points.
- Une turbulence homogène est forcément infiniment grande et ne possède pas de condition limite.

Si le domaine n'est pas homogène, la loi de probabilité d'une grandeur peut varier d'un point à un autre, donc ces 2 points ne peuvent pas considérer les échantillons de la même loi de probabilité. La turbulence homogène est une condition nécessaire pour que la moyenne en espace converge vers l'espérance. En plus, avec l'hypothèse d'homogénéité, pour calculer la moyenne en espace nous n'avons pas besoin de moyenner sur tout le domaine infini, mais sur un domaine assez grand pour converger vers la moyenne en espace.

$$\langle X(\boldsymbol{x}) \rangle_{\boldsymbol{x}} = \int_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3} X(\boldsymbol{x}) d^3 \boldsymbol{x} \simeq \int_{\boldsymbol{x} \in B} X(\boldsymbol{x}) d^3 \boldsymbol{x}$$
 (2.22)

La condition pour qualifier un domaine d'être "assez grand" sera discuté plus tard dans ce chapitre.

L'homogénéité parfaite de la turbulence n'existe pas dans la nature, on le trouve dans les concepts virtuels comme celui de la turbulence infinie, ou celui de la boite périodique. Nous devons donc élargir le concept d'homogénéité pour pouvoir l'appliquer dans la réalité. Les turbulences sont quasiment homogènes si le domaine d'étude est très loin des éléments qui imposent les conditions limites. Nous pouvons évaluer l'homogénéité par les grandeurs statistiques dans un tel domaine.

2.3.3 Isotropie avec symétrie miroir

Définition : une turbulence est dite (statistiquement) isotrope si toutes les grandeurs statistiques représentatives de cette turbulence sont invariantes par une rotation quelconque ou une réflexion miroir sur un plan.

Cette propriété peut s'énoncer de façon plus simple : il n'existe aucune direction privilégiée dans la turbulence et le système est symétrie miroir ⁴.

Il faut noter que cette notion d'isotropie est différente de la notion de tenseur isotrope : Un tenseur isotrope d'ordre impair est donc forcément nul. Un tenseur

^{4.} Dans le cadre de cette thèse, la notion isotropie comprend la symétrie miroir

isotrope d'ordre pair doit être une combinaison dyadique des tenseurs isotropes des ordres inférieurs :

- Le tenseur d'ordre 0 : tous les scalaires sont naturellement isotropes.
- Le tenseur d'ordre 2 est forcément de la forme : $t_{ij} = f \delta_{ij}$ avec f est un scalaire et δ_{ij} est le tenseur identité
- Le tenseur d'ordre 4 est une combinaison linéaire des produits dyadiques des tenseurs identités : $t_{ijkl} = \mathcal{L}(\delta_{ij}.\delta_{kl},\delta_{ik}.\delta_{jl},\delta_{il}.\delta_{jk})$

Or, les statistiques d'un écoulement isotrope ne sont pas nécessairement des tenseurs isotropes : par exemple, un moment conjoint entre 2 points A et B peut avoir une direction privilégiée suivant \overrightarrow{AB} .

L'hypothèse de l'isotropie apporte des simplifications suivantes :

- Les grandeurs statistiques en 1 point doivent être des tenseurs isotropes.
- Soit 2 points A et B, nous avons le vecteur direction $\mathbf{r} = \overrightarrow{AB}$. Les grandeurs statistiques conjointes en 2 points A et B sont des tenseurs de forme spéciale :
 - Les tenseurs d'ordre 0 sont des scalaires qui sont des fonctions uniquement de la distance r entre A et B : t = a(r)
 - Les tenseurs d'ordre 1 sont les vecteurs de la forme : $t_i = f(r)r_i$
 - Les tenseurs d'ordre 2 sont de la forme [59] :

$$t_{ij} = f_1(r)\delta_{ij} + f_2(r)\frac{r_i \cdot r_j}{r^2}$$
(2.23)

- Les tenseurs d'ordres supérieurs peuvent se construisent à partir des produits dyadiques des tenseurs d'ordre inférieur.
- Nous pouvons continuer cette règle pour simplifier les tenseurs statistiques avec 3, 4 ou plus de points. Mais dans cette thèse nous n'allons pas évoquer les moments conjoints avec plus de 3 points.

2.3.4 Stationnarité

La stationnarité au sens strict est définie de manière similaire avec l'homogénéité : Une variable aléatoire dépendante du temps A(t) est dite strictement stationnaire si et seulement si n'importe quels moments sont invariants par translation en temps. En pratique, pour les statistiques temporaires, nous avons besoin des hypothèses moins strictes : nous définissons et utilisons 2 ordres statistiquement stationnaires suivant :

- Ordre 1 : si et seulement si l'espérance de la variable aléatoire est indépendante du temps. Cette espérance est la limite de la moyenne temporelle quand le temps tend vers l'infini.
- Ordre 2 : si et seulement si elle satisfait les condition de l'ordre 1 plus la condition où la fonction auto-corrélation (ou bien la covariance) $\langle A(t).A(t + \Delta t) \rangle$ ne dépend pas de t et ne dépend que de l'écart Δt

Dans ce travail, nous allons imposer l'hypothèse que les écoulements forcés vont atteindre un état stationnaire d'ordre 2 après un certain temps. Cette hypothèse serait vérifiée a posteriori.

2.3.5 Ergodicité

L'ergodicité est une condition où la moyenne en espace, en temps, et en réalisation d'une variable aléatoire A converge vers son espérance. La condition pour que l'ergodicité soit satisfaite peut être formulée de façons rigoureuse mathématiquement. Par exemple pour le temps, on a :

$$\lim_{T \to \infty} \left(\frac{1}{T^2} \int_T \int_T \langle (A(t) - \langle A(t) \rangle) (A(t') - \langle A(t') \rangle) \rangle \, dt dt' \right) = 0 \tag{2.24}$$

En général, l'hypothèse d'ergodicité est admise : une turbulence homogène est supposée être ergodique en espace, cela implique que la moyenne en espace peut remplacer la moyenne de réalisation :

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{u} \rangle_V \tag{2.25}$$

Une turbulence stationnaire est supposée être ergodique en temps, d'où la moyenne en temps peut remplacer la moyenne de réalisation :

$$\langle \mathbf{u} \rangle = \langle \mathbf{u} \rangle_t$$
 (2.26)

Par la suite, nous considérons seulement une turbulence homogène isotrope, dont la moyenne est confondue avec l'espérance.

2.3.6 Décomposition de Reynolds - Statistiques en 1 point

Un outil très fréquemment utilisé est une décomposition de Reynolds qui a pour but de séparer l'écoulement moyen des fluctuations :

$$\mathbf{u} = \langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}' \tag{2.27}$$

où $\langle \mathbf{u} \rangle$ est l'écoulement moyen et \mathbf{u}' est le champs des fluctuations. Dans la littérature, le champs moyen $\overline{\mathbf{u}}$ est souvent noté avec une majuscule pour le distinguer du champs fluctuant. Cet outil est très utilisé dans les écoulements avec des géométries complexes. Nous pouvons écrire l'équation dynamique de n'importe quel moment de la variable aléatoire \mathbf{u} à partir de l'équation de Navier-Stokes, notamment le moment d'ordre 2 qui est connu sous le nom de "tenseur de Reynolds" : $\overline{u_i u_j}$ puisqu'il est lié directement à la notion d'énergie cinétique. La dynamique du tenseur de Reynolds est décrit par l'équation (2.28) ci-dessous, qui est obtenue par la multiplication dyadique de l'équation de Navier-Stokes avec le vecteur \mathbf{u} puis en prenant la moyenne de l'équation résultante :

$$\partial_t \overline{u_i u_j} + U_l \partial_l \overline{u_i u_j} + \overline{u_i u_l} \partial_l U_j + \partial_l \overline{u_i u_j u_l} = -\overline{u_i \partial_j p} - \overline{u_j \partial_i p} + \nu \partial_l^2 \overline{u_i u_j} - 2\nu_f \overline{\partial_i u_l \partial_l u_j} \quad (2.28)$$

Pour la géométrie simple prise dans ce travail de thèse (boîte de THI sans parois), on impose que le champ moyen soit être identiquement nul (voir condition d'isotropie). Toutes les dérivations spatiales des grandeurs statistiques doivent également être nulles, donc, l'équation (2.28) devient :

$$\partial_t \overline{u_i u_j} = -\overline{u_i \partial_j p} - \overline{u_j \partial_i p} - 2\nu_f \overline{\partial_i u_l \partial_l u_j}$$
(2.29)
En prenant la trace des tenseurs de l'équation (2.29), nous retrouvons la variation en temps de l'énergie cinétique qui est l'opposée de la somme des moyennes de la "pseudo dissipation" ⁵ : $\epsilon_f = \nu_f \overline{\partial_j u_i \partial_i u_j}$ et d'une corrélation vitesse-pression $\overline{u_i \partial_i p}$. Pour une turbulence homogène, la moyenne de la pseudo-dissipation est égale à la moyenne de la dissipation.

2.3.7 Corrélation spatiale - Statistiques en plusieurs points

Les moments conjoints peuvent aussi être appelés les corrélations. Ils révèlent les dépendances causales entre les variables aléatoires. Parmi les corrélations, l'auto-corrélation de la fluctuation de vitesse a été très bien étudiée. Elle est définie comme suit :

$$\phi_{ij}(\boldsymbol{r}) = \langle u_i(\boldsymbol{x}), u_j(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{r}) \rangle_{\boldsymbol{x}}$$
(2.30)

où $\langle . \rangle_{\boldsymbol{x}}$ dénote la moyenne sur toutes les positions \boldsymbol{x} (moyenne en espace), la moyenne résultant n'est plus dépendante de la variable \boldsymbol{x} .

Analyser cette quantité peut nous fournir des informations intéressantes :

- La distance minimale qui sépare 2 points complètement décorrélés peut être définie comme la taille de la structure la plus grande : au delà de cette taille, les points ne sont pas liés à une même structure, donc on peut les considérer statistiquement indépendants. Cette échelle est importante pour définir la taille de domaine pour calculer les moyennes : pour approcher de manière correcte l'espérance par la moyenne (avec une erreur à 10 % près par exemple), il faut juste que le domaine, pour faire la moyenne, contienne au moins 100 structures indépendantes au lieu de faire l'intégrale sur tout le domaine infini [69].
- La trace de la fonction d'auto-corrélation a la dimension de l'énergie, elle est utilisée pour définir la contribution de l'énergie des structures de taille r donnée.

Sous l'hypothèse d'homogénéité et d'isotropie, le tenseur de corrélation s'écrit sous la forme :

$$\phi_{ij}(\boldsymbol{r}) = f_1(\boldsymbol{r})\delta_{ij} + f_2(\boldsymbol{r})\frac{r_i \cdot r_j}{r^2}$$
(2.31)

Il est plus aisé d'imaginer la géométrie en introduisant 2 tenseurs de projection P_{ij} et Π_{ij} :

$$P_{ij}(\boldsymbol{r}) = \delta_{ij} - \frac{r_i \cdot r_j}{r^2}$$
(2.32)

$$\Pi_{ij}(\boldsymbol{r}) = \frac{r_i \cdot r_j}{r^2} \tag{2.33}$$

Le tenseur Π_{ij} est un tenseur de projection suivant la direction \mathbf{r} , et le tenseur P_{ij} est un tenseur de projection sur un plan perpendiculaire au vecteur \mathbf{r} . Le tenseur

^{5.} On note la dissipation visqueuse ϵ_f avec l'indice f pour distinguer la dissipation par effets visqueux de celle due aux effets des polymères (noté ϵ_p) qui sera introduite dans les chapitres suivants

de corrélation peut s'écrire comme une combinaison linéaire de ces 2 tenseurs projections :

$$\phi_{ij}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\langle \mathbf{u}^2 \rangle} \left(f(\boldsymbol{r}) P_{ij} + g(\boldsymbol{r}) \Pi_{ij} \right)$$
(2.34)

où $f(\mathbf{r})$ et $g(\mathbf{r})$ sont des fonctions de corrélations longitudinale et transversale normalisées. Plusieurs études ont été réalisées sur ces fonctions [51], ses formes sont bien connues pour le cas homogène et isotrope (THI). On a représenté sur la figure 2.1 les allures typiques des courbes f et g ainsi que leur interprétation en terme de corrélation.



FIGURE 2.1: Corrélation longtudinale $f(r) = \langle u_1(x).u_1(x+r) \rangle$ et corrélation transversale $g(r) = \langle u_2(x).u_2(x+r) \rangle$

Dans une THI, les fonctions f et g sont indépendantes de la direction de r, elles sont fonction uniquement de la norme r = |r|. Nous avons une relation remarquable que nous pouvons montrer analytiquement entre f(r) et g(r) dans une THI [51] :

$$g(r) = f(r) + \frac{r}{2}\partial_r f(r)$$
(2.35)

A partir de la fonction de corrélation f, nous pouvons construire une échelle de longueur notée L_K , telle que 2 points séparés d'une distance d > L auraient une corrélation négligeable. Cette échelle est définie par :

$$L_K = \int_{0}^{\infty} f(r)dr \tag{2.36}$$

Cette échelle est appelée l'échelle intégrale, c'est est l'échelle caractéristique la plus grande dans la turbulence.

Afin de comparer différents travaux, il est commode d'utiliser une autre échelle, c'est la micro échelle de Taylor (notée λ). Historiquement, cette échelle est définie

à partir du développement limité de la fonction corrélation longitudinale f:

$$f(r) = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^2 + o(r^4)$$
 (2.37)

La micro échelle de Taylor est en relation directe avec la fluctuation de vitesse, on défini le moment statistique d'ordre 2 de la vitesse u_{rms} comme une échelle de vitesse caractéristique de la turbulence :

$$u_{rms} = \left\langle \mathbf{u}^2 - \left\langle \mathbf{u} \right\rangle^2 \right\rangle_{\mathbf{X}} \tag{2.38}$$

Nous pouvons relier la micro échelle avec la dissipation par la relation :

$$\epsilon_f = 15\nu_f \frac{u_{rms}}{\lambda} \tag{2.39}$$

Nous définissons le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Taylor par :

$$Re_{\lambda} = \frac{u_{rms}\lambda}{\nu_f} \tag{2.40}$$

2.3.8 Suivi de particules

Notre simulation est basée sur la vison Eulérienne, mais ça ne nous empêche pas d'avoir une vision Lagrangienne. Pour ce faire, il suffit d'injecter les particules traceurs dans l'écoulement et de suivre leur dynamique : la vitesse instantanée des particules traceurs est interpolée à partir des vitesses Eulériennes aux noeuds du maillage du domaines étudié. Dans les simulations numériques, différentes des expériences, nous pouvons avoir des traceurs "parfaits" qui suivent exactement la vitesse du fluide autour. Analyser les statistiques Lagrangiennes dans les simulations numériques est donc particulièrement intéressant.

Par manque de temps, nous ne présentons pas ces résultats

2.4 Analyse de Fourier

2.4.1 Rappel sur la transformation de Fourier

Cette partie a pour but de rappeler les propriétés importantes de la transformée de Fourier. La transformée de Fourier est appliquée à des fonctions intégrables à une variable sous la forme suivante :

$$\widetilde{f}^{k} = TF[f(x)]^{k} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-\underline{i}xk}dx \qquad (2.41)$$

Notation : on note une fonction transformée par le signe (...). Si la quantité à transformer est trop encombrante, on emploie la notation TF[.]. Nous notons la dépendant au variables spectraux par un super-script.

Dans la littérature, les auteurs peuvent faire des changements de variable comme $x' = \frac{x}{2\pi}$ ou $k' = \frac{k}{2\pi}$ afin de simplifier les calculs. Nous pouvons donc y

trouver des définitions légèrement différentes de la transformée de Fourier comme les suivantes :

$$\widetilde{f}^{k} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-\underline{i}2\pi xk} dx \qquad (2.42)$$

$$\widetilde{f}^{k} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-\underline{i}xk}dx \qquad (2.43)$$

$$\widetilde{f}^{k} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-\underline{i}2\pi xk}dx \qquad (2.44)$$

Le choix entre (2.41), (2.42), (2.43) et(2.44) est arbitraire.

Dans ce travail nous prenons la formule (2.41) adaptée à la bibliothèque JMFFT et utilisée dans le code de nos simulations.

La transformée de Fourier peut être généralisée pour être appliquée à des fonctions multi-variables. Ce n'est rien d'autre que d'effectuer les transformations successives dans chaque direction de l'espace :

$$\widetilde{f}^{\boldsymbol{k}} = TF[f(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}} = \int_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^D} f(\boldsymbol{x}) e^{-\underline{i}2\pi \boldsymbol{k}.\boldsymbol{x}} d^3 \boldsymbol{x}$$
(2.45)

Dans notre cas, le nombre de dimensions D = 3.

Les propriétés importantes de la transformée de Fourier sont les suivantes :

— La transformée de Fourier est linéaire :

$$TF[(C_1f(\boldsymbol{x}) + C_2g(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}} = C_1TF[f(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}} + C_2TF[g(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}}$$
(2.46)

— Translation dans l'espace physique et l'espace de Fourier :

$$TF[f(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0)]^{\boldsymbol{k}} = TF[f(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}} \cdot e^{-\underline{i}2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}_0}$$
(2.47)

$$TF\left[f(\boldsymbol{x})e^{-\underline{i}2\pi\boldsymbol{k}_{0}.\boldsymbol{x}}\right]^{\boldsymbol{k}} = TF[f(\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{0}}$$
(2.48)

— Changement d'échelle :

$$TF[f(C_1.\boldsymbol{x})]^{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{|C_1|} TF[f(\boldsymbol{x})]^{(\frac{\boldsymbol{k}}{C_1})}$$
(2.49)

- Dérivation :

$$TF\left[\frac{df(\boldsymbol{x})}{dx_i}\right](k) = \underline{i}k_i \cdot TF[f(\boldsymbol{x})](\boldsymbol{k})$$
(2.50)

— La transformée de Fourier est un opérateur quadri-périodique :

$$TF^4[f(\boldsymbol{x})] = f(\boldsymbol{x}) \tag{2.51}$$

— La transformée de Fourier inverse s'écrit :

$$f(x) = TF^{-1}[\widetilde{f(x)}^{k}](x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(k)e^{ixk}dk$$
 (2.52)

2.4.2 La transformée de Fourier appliquée à la turbulence :

Dans l'espace de Fourier, l'expression de la dérivation est calculée de manière exacte d'un point de vue résolution numérique. La transformée de Fourier est ainsi bien adaptée pour résoudre les équations différentielles. En plus, la transformée de Fourier consiste en l'analyse des modes harmoniques, qui ont une relation particulièrement forte avec la notion d'échelle et de taille de tourbillons en mécanique des fluides.

L'application de la transformée de Fourier directement aux champs de vitesse rencontre des difficultés conceptuelles : la transformé de Fourier ne convergence pas au sens strict, autrement dit, la condition suffisante que nous utilisons pour montrer que la transformée de Fourier existe est que la fonction à transformer doit être intégrable. Cela veux dire que cette fonction doit décroître vers 0, quand la norme de \boldsymbol{x} tend vers ∞ , plus rapidement que $\frac{1}{|\boldsymbol{x}|}$. Mais cette condition n'a pas de sens physique quand nous l'appliquons au champ de vitesse de la turbulence à l'infini.

Nous pouvons contourner ce problème en utilisant, au lieu de travailler avec le champ de vitesse, la fonction auto-corrélation $R_{ij}(\mathbf{r}, t)$, qui physiquement, doit décroître rapidement vers zéro quand $|\mathbf{x}|$ tend vers l' ∞ . Le spectre d'énergie cinétique est alors défini comme la transformée de Fourier de la fonction $\phi_{ij}(\mathbf{r})$:

$$\widetilde{\phi_{ij}}^{\boldsymbol{k}} = \int_{\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3} \langle u_i(\boldsymbol{x}) . u_j(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{r}) \rangle_{\boldsymbol{x}} e^{-\underline{i} \boldsymbol{r} \boldsymbol{k}} d^3 \boldsymbol{r}$$
(2.53)

Certains travaux de la littérature travaillent avec la fonction auto-corrélation comme lorsqu'on emploie l'équation de Karman-Howarth [51].

2.4.3 Modélisation d'une THI par une boîte périodique

Comme la THI est un concept irréaliste, l'approche classique est de partir d'une turbulence finie (où la transformée de Fourier existe) et puis faire une limite des quantités qui nous intéressent quand le domaine s'étend à l'infini [45]. Mais c'est une approche très compliquée à mettre en oeuvre.

Une deuxième approche est d'imposer une condition périodique au système : nous conservons alors la valeur du champ quelconque f (f peut être un champ de scalaire, vecteur ou tenseur) dans une boite B_{L_b} de taille L_b . La valeur du champ en dehors de cette boite est calculée par la périodicité suivante :

$$f(\boldsymbol{x} + \mathbf{n}.L_b) = f(\boldsymbol{x}) \tag{2.54}$$

où $\boldsymbol{x} \in B_{L_b}$, $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$, sachant que pour une fonction périodique quelconque, on peut calculer une série de Fourier qui converge absolument vers cette fonction. Nous pouvons approximer de manière "exacte" notre domaine périodique par une série de Fourier 3D qui peut être considérée comme une discrétisation de la transformée de Fourier.

Cette deuxième approche est très intéressante si la taille de la boite du domaine de calcul est assez grande. Cela peut reproduire assez fidèlement une turbulence infinie, sans passer par l'opération limite comme pour la première approche. La périodisation dans l'espace physique conduit à une discrétisation dans l'espace de Fourier. Pour la simulation numérique, nous sommes obligés de discrétiser, donc cette configuration est bien adaptée. Par la suite nous allons voir comment la condition périodique affecte les fonctions dans l'espace spectral.

La comparaison entre une boîte périodique et la THI nous amène à comparer la série de Fourier avec la transformée de Fourier, puisqu'une fonction intégrable peut être reconstruire de manière exacte à l'aide de la transformé de Fourier (équation (2.52)), or une fonction périodique peut être décomposée (équation (2.55)) et reconstruit (équation (2.56)) de manière exacte à l'aide d'une série de Fourier :

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \widehat{f}(\mathbf{n}) e^{i2\pi \frac{\mathbf{n}}{L_b} \cdot \boldsymbol{x}}$$
(2.55)

où \hat{f} sont les coefficients de la série de Fourier, ils sont des fonctions des vecteurs entiers **n** et du temps t. La taille du domaine L_b est prise égale à 2π . Les coefficients de la série de Fourier sont calculés par :

$$\widehat{f}(\mathbf{n}) = \int_{\boldsymbol{x} \in B_{L_b}} f(\boldsymbol{x}) e^{-\underline{i}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{x}} d^3 \boldsymbol{x}$$
(2.56)

En introduisant la fonction de Dirac $\delta(\mathbf{k})$, nous pouvons démontrer la propriété suivante (voir annexe 7.4) :

$$TF(e^{\underline{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}}) = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0)$$
(2.57)

En appliquant la transformée de Fourier sur les 2 côtés de l'équation (2.55), en tenant compte du résultat (2.57), nous obtenons :

$$\widetilde{f}(\boldsymbol{k}) = TF\left(\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3}\widehat{f}(\mathbf{n})e^{\underline{i}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{x}}\right) = \widehat{f}(\mathbf{n})\cdot\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3}TF(e^{\underline{i}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{x}}) = \widehat{f}(\mathbf{n})\cdot\sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{Z}^3}\delta(\boldsymbol{k}-\mathbf{n})$$
(2.58)

La relation (2.58) montre la relation entre la transformée de Fourier et la série de Fourier d'un champ périodique. La transformée de Fourier d'un champ périodique est un champ discret (somme des distributions de Dirac). Une conséquence est que toutes les grandeurs statistiques calculées dans l'espace de Fourier sont aussi discrètes. Afin de reproduire le comportement d'une turbulence infinie, il suffit d'interpoler les grandeurs statistiques en question pour obtenir une fonction continue.

Une autre implication importante de la relation (2.58) est que : une intégrale sur \tilde{f} est égale à la somme des coefficients de la série de Fourier :

$$\int_{\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3} \widetilde{f}(\boldsymbol{k}) d^3 \boldsymbol{k} = \int_{\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3} \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{N}^3} \widehat{f}(\mathbf{n}) \cdot \delta(\boldsymbol{k}-\mathbf{n}) d^3 \boldsymbol{k} = \sum_{\mathbf{n}\in\mathbb{N}^3} \widehat{f}(\mathbf{n})$$
(2.59)

Donc, nous pouvons remplacer tout les intégrales dans l'espace de Fourier par des sommes des modes de série de Fourier.

Nous pouvons montrer de manière analogue que la discrétisation dans l'espace physique conduit également à une périodisation dans l'espace de Fourier. L'impact de cette discrétisation sur la physique étudiée ici sera discuté dans la partie Méthode numérique (Chapitre III).

Par la suite, en tenant compte de la géométrie de notre problème (boite périodique), la série de Fourier \hat{f} est équivalente à la transformée de Fourier \tilde{f} (Nous pouvons montrer que les propriétés sur \tilde{f} peuvent s'appliquer, de manière similaire, à \hat{f}). Les variables dans l'espace de Fourier sont comprises au sens de la transformée de Fourier quand nous discutons la physique de l'écoulement car les arguments ne sont pas limités à la géométrie périodique mais extensibles aux cas plus généraux. Par contre, quand nous évoquons les calculs pratiques, les variables dans l'espace de Fourier sont comprises au sens de la série de Fourier (discrète), et elles seront notées avec la même notation \hat{f} .

Il est également important d'évaluer les modifications de la périodicité sur les statistiques dans l'espace physique et de faire les corrections nécessaires. Ici on prend la fonction auto-corrélation pour example. Pour toutes les autres grandeurs statistiques dans l'espace physique, on doit prendre la même précaution.

Effectivement, la condition de périodicité du champ de vitesse impose une périodicité sur la fonction de corrélation :

$$\phi_{ij}(\boldsymbol{r} + \mathbf{n}L_b, t) = \langle \mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{r} + \mathbf{n}L_b, t) \rangle_{\boldsymbol{x}} = \langle \mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{r}, t) \rangle_{\boldsymbol{x}} = \phi_{ij}(\boldsymbol{r}, t)$$
(2.60)

Donc la condition de périodisation introduit un phénomène non physique qu'il faut éliminer. La condition d'isotropie impose $\phi_{ij}(\mathbf{r},t) = \phi_{ij}(-\mathbf{r},t)$. Pour éliminer l'effet de la périodicité, il faut limiter \mathbf{r} à une boite de taille L_b centrée en zéro et considérer que la corrélation en dehors de cette limite est nulle : Il faut assurer en plus qu'il n'y a pas de discontinuité : $\phi_{ij}(\mathbf{r})$ doit être très proche de 0 quand $|\mathbf{r}|$ approche $L_b/2$. Cette condition revient à une condition où la taille de la boite est assez grande par rapport à l'échelle intégrale pour assurer que les moments statistiques soient bien convergés (loi des grandes nombres). Il faut donc que l'échelle intégrale soit assez petite par rapport à L_b (qui est prise égale à 2π) pour obtenir une statistique correcte.

Par la suite, la notion boîte périodique B_{L_b} peut être remplacé par une notion plus générale, qui est le domaine de calcul \mathcal{D} pour des résultats ne se restreint au boîte périodique.

2.4.4 Équation de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier

Comme nous avons vu dans la section précédent (2.4.3), la transformation des fonctions aux coefficients de la séries de Fourier $(\hat{*})$ peuvent être considéré comme une discrétisation de la transformé de Fourier $(\hat{*})$. Nous pouvons appliquer cette transformation aux équations gouvernant pour construire des équations dans l'espace de Fourier.

Les équations de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier s'écrivent :

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{\boldsymbol{u}} + (\widehat{\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}}) = -\widehat{\nabla p} + \nu_f \widehat{\Delta \mathbf{u}}$$
(2.61)

$$\widehat{\nabla} \cdot \widehat{\mathbf{u}} = 0 \tag{2.62}$$

on obtient la forme indicielle avec la propriété (2.50):

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{u}_n + \left(\widehat{u_l}\frac{\partial}{\partial_l}\overline{u_n}\right) = -\underline{i}k_n\widehat{p} - \nu k_m^2\widehat{u}_n \tag{2.63}$$

$$\underline{i}k_n\widehat{u}_n = 0 \tag{2.64}$$

La condition (2.64) montre que : dans l'espace de Fourier, la vitesse \hat{u} est toujours perpendiculaire au vecteur d'onde k.

Nous pouvons éliminer la pression dans l'équation (2.63) grâce à l'équation (2.64). Pour ce faire, nous multiplions tous les termes de l'équation (2.63) avec $\underline{ik_n}$:

$$\underline{i}k_n\frac{\partial}{\partial_t}\widehat{u}_n + \underline{i}k_n(u_l\frac{\partial}{\partial_l}u_n) = k_n^2\widehat{p} + \underline{i}k_n(\nu_f\frac{\partial^2}{\partial_l^2}\widehat{u}_n)$$
(2.65)

D'où :

$$\frac{\partial}{\partial_t}(ik_n\hat{u}_n) + \underline{i}k_n(\widehat{u_l}\frac{\partial}{\partial_l}u_n) = k_n^2\hat{p} + \nu_f\frac{\partial^2}{\partial_l^2}(\underline{i}k_n\hat{u}_n)$$
(2.66)

Comme $k_n u_n = 0$, l'équation (2.66) devient : $\underline{i}k_n(\widehat{u_l}_{\partial_l}u_n) = k_n^2 \widehat{p}$ Posons : $M_n = (\widehat{u_l}_{\partial_l}u_n)$, on a : $\frac{\partial}{\partial_n}M_n = -\frac{\partial^2}{\partial_n^2}\widehat{p}$ Après avoir changé les indices muets, on a : $\widehat{p} = \frac{ik_m}{k_l^2}M_m$

$$\frac{\partial}{\partial_n}\widehat{p} = \underline{i}k_n\widehat{p} = \underline{i}k_n\frac{ik_m}{k_l^2}M_m = -\frac{k_nk_m}{k_l^2}M_m.$$
(2.67)

Nous pouvons donc remplacer la nouvelle expression de \hat{p} dans l'équation (2.63) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{u}_n + M_n = \frac{k_n k_m}{k_l^2} M_m - \nu_f k_m^2 \widehat{u}_n \qquad (2.68)$$

(2.69)

Si $\mathbf{I} = \delta_{mn}$ est la matrice identité, on peut écrire : $M_n = \delta_{mn} M_m$, et on obtient finalement :

$$\frac{\partial}{\partial t}\widehat{u}_n + M_m\left(\delta_{mn} - \frac{k_n k_m}{k_l^2}\right) = -\nu_f k_m^2 \widehat{u}_n \tag{2.70}$$

(2.71)

La matrice $\left(\delta_{mn} - \frac{k_n k_m}{k_l^2}\right)$ s'appelle le projecteur de Craya \mathbf{P}_c [66]. Le terme $\frac{k_n k_m}{k_l^2}$ est une projection suivant la direction du vecteur d'onde \mathbf{k} . Si nous prenons la matrice à laquelle on a soustrait sa projection suivant la direction du vecteur d'onde, nous obtenons la projection sur un plan perpendiculaire au vecteur d'onde.

L'équation de Navier-Stokes s'écrit donc :

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \nu_f k_m^2\right\} \widehat{u}_n = -\mathbf{P}_c \left\{\widehat{u_l} \frac{\partial}{\partial_l} u_n\right\}$$
(2.72)

L'équation (2.72) montre un mécanisme important : c'est la pression qui assure que le vecteur vitesse soit perpendiculaire au vecteur d'onde, donc elle est responsable du maintien de l'incompressibilité dans l'écoulement : s'il y a une compression locale, la pression va augmenter et diffuser cette compression, sur tout le domaine, à la vitesse du son. C'est pour cette raison que la limite compressible/ incompressible est basée sur la vitesse relative à la vitesse du son (nombre de Mach).

Nous avons vu que le gradient de vitesse apparaît 2 fois dans l'équation de Navier-Stokes : dans le terme d'advection et dans le terme de dissipation. Pour accélérer le calcul, nous introduisons le champ \boldsymbol{w} qui est le champ de vorticité $\boldsymbol{w} = \mathbf{rot}(\mathbf{u}) = \nabla \wedge \mathbf{u}$ avec l'opérateur \wedge qui est la multiplication vectorielle. Son écriture sous forme indicielle est : $\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w} = u_n \varepsilon_{nml} w_n$, où ε_{ijk} est le symbole de Levi-Civita :

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & si \ (i,j,k) \in \{(1,2,3), (3,1,2), (2,3,1)\} \\ -1 & si \ (i,j,k) \in \{(1,3,2), (2,1,3), (3,2,1)\} \\ 0 & si \ i = j \ ou \ j = k \ ou \ k = i \end{cases}$$
(2.73)

Il est calculé dans l'espace de Fourier simplement à l'aide du produit vectoriel de la vitesse par le nombre d'onde k:

$$\widehat{\boldsymbol{w}} = \underline{i}\boldsymbol{k} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}} \tag{2.74}$$

Le carré du champ de vorticité est l'enstrophie qui est directement proportionnelle à la dissipation (sous hypothèse d'homogénéité [41]) :

$$\epsilon_f = \frac{\nu_f}{2} \langle \boldsymbol{w}.\boldsymbol{w} \rangle \tag{2.75}$$

Nous pouvons montrer que le terme d'advection peut être réécrit sous forme d'un produit vectoriel de la vitesse et de la vorticité dans une boîte de turbulence périodique :

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w}$$

La forme finale de l'équation de Navier-Stokes que nous avons implémenté dans le code utilisé dans ce travail est :

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \nu_f \boldsymbol{k}^2\right\} \widehat{\boldsymbol{u}} = -\mathbf{P}_c \left\{\widehat{\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w}}\right\}$$
(2.76)

Après avoir calculé le terme non linéaire en fonction du champ à la vitesse de l'instant actuel, nous pouvons utiliser des schémas numériques différents pour interpoler le champ de vitesse à l'itération suivante (Voir chapitre IV). Nous pouvons ajouter une force volumique f dans l'équation (2.76) pour établir un état d'équilibre. La force ajoutée peut ne pas avoir une signification physique, donc contrôler l'influence des forces sur les résultats est important.

2.4.5 Spectre d'énergie cinétique

Dans l'espace physique, une fonction de corrélation (définie comme dans l'équation 2.30) peut quantifier la liaison de deux points séparés par le vecteur r. Dans une configuration isotrope, la corrélation n'est pas dépendante de l'orientation de r:

$$R_{ij}(\boldsymbol{r},t) = R_{ij}(r,t) \tag{2.77}$$

où $r = |\mathbf{r}|$. La fonction R(r) a la même dimension que l'énergie cinétique, elle peut être interprétée comme une contribution des structures de taille r à l'énergie moyenne. Nous pouvons relier cette fonction avec le spectre d'énergie que nous calculons dans l'espace de Fourier par le théorème de Wiener [45] :

$$\delta(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}') \int_{\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3} \mathbf{R}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}^3 = \left\langle \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}'} \right\rangle$$
(2.78)

Nous définissons $E_K^{\mathbf{k}}$ comme le spectre 3D d'énergie cinétique :

$$E_K^{\boldsymbol{k}} = \int_{\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3} \mathbf{R}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}^3$$
(2.79)

Dans notre géométrie de boîte périodique, l'espace de Fourier devient discrète, la fonction de Dirac deviens 1 à zéro et nulle ailleurs, avec une dimension d'une volume. On écrit directement :

$$E_K^{\boldsymbol{k}} = \left\langle \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}} \right\rangle \tag{2.80}$$

Le spectre 1D est calculé comme la somme sur tous les modes appartenant à une coquille sphérique $S_k = \{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 | k - 0.5 < |\mathbf{k}| \le k + 0.5 \}$ (les modes de même longueur d'onde arrondi à une unité près) :

$$E_K(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} E_K^{\boldsymbol{k}}.$$
(2.81)

Nous pouvons dériver une équation qui décrit la dynamique du spectre d'énergie cinétique à partir de l'équation (2.72). La procédure est de multiplier avec un produit scalaire chaque terme de l'équation (2.72) avec $\hat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}} = (\hat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}})^*$, nous obtenons alors :

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \nu_f \boldsymbol{k}^2\right\} E_K^{\boldsymbol{k}} = -\mathbf{P}_c \left\{\widehat{\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w}}\right\}^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}} + \widehat{\boldsymbol{f}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}}$$
(2.82)

où $\hat{f}^{k}.\hat{u}^{-k}$ présente la contribution énergétique de la force volumique ajoutée. Si nous regardons de plus près le terme qui correspond au transfert non linéaire dans l'équation de Navier-Stokes, ce terme s'écrit explicitement sous forme indicielle :

$$\mathbf{P}_{c}\left\{\widehat{\mathbf{u}\wedge\mathbf{w}}\right\}^{\mathbf{k}}\cdot\widehat{\mathbf{u}}^{-\mathbf{k}} = \left(\delta_{ij} - \frac{k_{i}k_{j}}{k^{2}}\right)\left(\widehat{\varepsilon_{mni}u_{m}w_{n}}\right)^{\mathbf{k}}\widehat{u_{j}}^{-\mathbf{k}}$$
(2.83)

On note qu'on peut travailler sur le terme $\left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right) \left(\widehat{\epsilon_{mni} u_m w_n}\right)^{k} \widehat{u_j}^{k}$ dans l'équation (2.83) en faisant la multiplication suivante :

$$\left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right) \widehat{u}_j^{-\boldsymbol{k}} = \widehat{u}_j^{-\boldsymbol{k}}$$
(2.84)

car $k_j \cdot \hat{u}_j^{-k} = 0$. Donc le projecteur $\left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right)$ disparaît dans l'équation (2.83), et on obtient :

$$\mathbf{P}_{c}\left\{\widehat{\mathbf{u}\wedge\mathbf{w}}\right\}^{\mathbf{k}}.\widehat{\mathbf{u}}^{-\mathbf{k}}=\left(\widehat{\varepsilon_{mni}u_{m}w_{n}}\right)^{\mathbf{k}}\widehat{u_{j}}^{-\mathbf{k}}$$
(2.85)

Nous pouvons appliquer une somme sur S_k de tous les termes de l'équation (2.82), nous obtenons une équation 1D, qui est appelée équation de Lin [41], qui décrit l'évolution du spectre 1D en fonction du temps.

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \nu_f k^2\right\} E_K(k) = T_f(k) + F(k)$$
(2.86)

Avec :

$$T_f(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} \left(\widehat{\varepsilon_{mni} u_m w_n}\right)^{\boldsymbol{k}} \widehat{u_j}^{-\boldsymbol{k}}$$
(2.87)

$$F(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} \widehat{f}_i^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{u}_i^{-\boldsymbol{k}}$$
(2.88)

Nous pouvons calculer l'échelle intégrale L_K (voir définition dans section 2.3.7equation 2.36) directement dans l'espace de Fourier par :

$$L_K = \frac{4}{3\pi} \int_0^\infty \frac{k^{-1} E_K(k)}{E_K(k)} dk$$
 (2.89)

Le pré-facteur $\frac{4}{3\pi}$ est souvent négligé dans la litté rature et donc n'apparaitra pas par la suite.

2.5 Phénoménologie

2.5.1 Injection d'énergie et échelle intégrale

Naturellement, l'échelle la plus énergétique est l'échelle où on injecte de l'énergie, cette quantité d'énergie sera transférée à d'autres échelles via le mécanisme d'advection. Dans une turbulence 2D, il existe une cascade inverse qui transfert d'énergie des petites échelles au grandes échelles.

Nous nous intéressons au turbulence 3D, où nous n'avons pas la cascade inverse, et énergie est transféré des grandes échelles vers les plus petites, donc l'échelle d'injection est l'échelle de longueur le plus grande. En général, elle est du même ordre de grandeur que l'échelle intégrale.

2.5.2 Théorie d'équilibre de Kolmogorov

Dans une turbulence Newtonienne classique, nous nous familiarisons avec l'image de cascade d'énergie cinétique qui fut introduite par Richardson (1922) : l'énergie cinétique de turbulence est produite à grandes échelles et transférée vers les petites échelles et principalement dissipée aux petites échelles. Il y a donc deux mécanismes principaux :

- Le transfert non linéaire est un mécanisme de transfert d'énergie des grandes échelles vers les plus petites échelles. Ce mécanisme correspond au terme de transport dans l'équation de Navier-Stokes $(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$, donc il est aussi appelé le transfert par convection. La quantité d'énergie transférée est diminuée quand nous nous déplaçons vers les plus petites échelles.
- La dissipation visqueuse représente la perte de l'énergie mécanique par le frottement visqueux, elle correspond au terme de dissipation dans l'équation de Navier-Stokes : $\nu_f \Delta \mathbf{u}$. La dissipation visqueuse croit quand nous nous déplaçons vers les plus petites échelles jusqu'à un maximum où l'énergie fournie par les grandes échelles, via le transfert non linéaire, est toute dissipée.

Il est donc important de considérer le rapport entre les effets visqueux et le transfert non linéaire. Ce rapport est caractérisé par l'échelle de Kolmogorov (noté η) : pour les échelles plus grandes que l'échelle de Kolmogorov, le transport non linéaire domine les effets visqueux (domaine inertiel). Pour les échelles plus petites que l'échelle de Kolmogorov, ce sont les effets visqueuses qui dominent (domaine dissipatif). L'échelle de Kolmogorov est aussi une échelle où la dissipation visqueuse est maximale.

L'idée de la théorie de Kolmogorov peut être résumée par l'image suivante : quand le nombre de Reynolds est très grand (en faisant tendre la viscosité vers zéro par exemple), la dissipation visqueuse tend vers une constant ϵ_0 , et l'échelle de Kolmogorov est repoussée vers des échelles très petites ($\eta \to 0$).

Comme la dissipation est maximale à l'échelle de Kolmogorov η , qui est repoussée vers zéro (correspond à un nombre d'onde infini : $k_{\eta} \sim 1/\eta \rightarrow \infty$), pour une échelle l > 0 donnée, la dissipation reste très faible par rapport à la dissipation totale ε_0 . L'hypothèse de Kolmogorov est donc de négliger la dissipation visqueuse pour les échelles dans la zone inertielle, donc les statistiques sont indépendantes de la viscosité. L'énergie cinétique est injectée à l'échelle intégrale et transférée sans pertes entre les échelles dans la zone inertielles jusqu'à la zone dissipative et dans cette zone elle sera complètement dissipée, donc les échelles dans la zone dissipative sont dépendantes de la viscosité et de la dissipation.

La position de l'échelle de Kolmogorov par rapport à l'échelle intégrale dépend

du nombre de Reynolds :

$$\frac{L_K}{\eta} \sim R e_{\lambda}^{3/4} \tag{2.90}$$

Avec ces raisonnements, Kolmogorov a posé 3 hypothèses (qui sont applicables quand l'écoulement en question a un nombre de Reynolds suffisamment important):

- Isotropie locale : les échelles très petites par rapport à l'échelle intégrale L_K sont statistiquement isotropes.
- Première hypothèse de la similitude : les statistiques des plus petites échelles (de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov η) ont une forme universelle et dépendent et de la viscosité ν_f et de la dissipation visqueuse ϵ_f . Ces échelles constituent la zone dissipative
- Deuxième hypothèse de la similitude : les statistiques de l'échelle l, qui est très petite par rapport à l'échelle intégrale L_K , mais très grande par rapport à l'échelle Kolmogorov (η) $(L_K \gg l \gg \eta)$ ont une forme universelle et dépendent de la dissipation visqueuse ϵ_f et de l'échelle l. Ces échelles constituent la zone inertielle.

A partir des hypothèses de Kolmogorov, avec une analyse dimensionnelle, nous arrivons à définir les variables liées à l'échelle de Kolmogorov par :

- l'échelle de longueur $\eta = (\nu_f^3/\epsilon_f)^{1/4}$
- l'échelle de temps $t_{\eta} = \sqrt{\nu_f/\epsilon_f}$ l'échelle de vitesse $U_{\eta} = (\nu_f \epsilon_f)^{1/4}$

Dans la zone inertielle $(1/L_K \ll k \ll 1/\eta)$, avec les analyses dimensionnelles, nous pouvons montrer que le spectre d'énergie cinétique suit une loi de puissance : $E_K(k) \sim k^{-5/3}$

Conclusion 2.6

Dans ce chapitre, nous avons vu les hypothèses et les analyses classiques appliquées à un écoulement turbulent dit homogène et isotrope (THI). Nous nous basons sur l'image classique de la turbulence Newtonienne de Richardson, et notre objectif dans cette thèse est de chercher à comprendre comment les polymères rentrent dans cette image, comment ils interagissent avec la turbulence. Dans le chapitre suivant, nous allons présenter les modèles utilisés pour décrire la dynamique des polymères et leur interaction avec le fluide porteur.

Chapitre 3

Dynamique des polymères

Sommaire

3.1	\mathbf{Intr}	oduction	48
3.2	Pro	priété générale d'un polymère	48
	3.2.1	Propriété chimique d'un polymère	48
	3.2.2	Conformation et flexibilité	50
3.3	Mod	lélisation d'un polymère par une chaîne idéale	54
	3.3.1	Marche aléatoire et distribution Gaussienne	54
	3.3.2	Amélioration du modèle	55
	3.3.3	Entropie et loi de Hooke du polymère	57
	3.3.4	Chaîne Gaussienne et chaîne FENE	58
3.4	Inte	raction polymère-polymère	60
3.5	Moo	lèle microscopique du polymère dans un écoulement	60
	3.5.1	Modèle de Langevin pour une particule	61
	3.5.2	Modèle de FENE-M et Rousse pour un polymère	62
	3.5.3	L'effort créé par le polymère	64
3.6 Modèles macroscopiques du polymère dans un écou-			
	leme	ent	67
	3.6.1	Équation gouvernant la dynamique du fluide porteur	67
	3.6.2	Tenseur de conformation	68
	3.6.3	Équation gouvernant la dynamique des polymères : mo- dèle Oldrovd-B et FENE-P	69
	3.6.4	Adimensionnement et formulation du modèle	71
	3.6.5	Formulation générale	72
	3.6.6	Bilan d'énergie	73
	3.6.7	Signification physique des paramètres	74
3.7	Inte	raction polymères-turbulence	77
3.8	Con	clusion	78

3.1 Introduction

Un fluide non Newtonien peut être créé par un mélange entre un **solvant newtonien** et un **soluté de polymère**. Des polymères peuvent emmagasiner de l'énergie quand ils s'étirent, ce qui donnent au solution une caractère élastique. Mais grâce au solvant, la solution a également un comportement visqueux. Le mélange a donc un comportement visco-élastique. Il existe plusieurs techniques pour simuler le comportement des polymères :

- 1. des modèles atomiques (Monte-Carlo et simulation dynamique moléculaire). Ils sont typiquement utilisés pour étudier les réactions chimiques entre les polymères et le solvant, pour des temps très courts (de quelque nanosecondes)
- 2. des modèles mésocopiques avec une approche macroscopique pour le solvant et microscopique pour le fluide. Cela nécessite des simulations utilisant le mouvement Brownien et même si le coût de calcul est réduit par rapport au modèle atomique, c'est encore trop cher pour coupler le polymère avec un écoulement 3D turbulent.
- 3. des modèles macroscopiques basés sur des statistiques d'ensemble des polymères. Cela nécessite néanmoins une description continue des polymères (modèle FENE-P, Oldroyd-B).

Dans cette thèse nous utilisons un modèle macroscopique de polymères de type FENE-P que nous exposons dans cette partie qui comprend :

- La dynamique d'une seule chaîne de polymères avec les propriétés chimiques et de conformations.
- Les interactions polymère-polymère.
- Des modèles microscopiques pour la dynamique du polymère dans un écoulement.
- Des modèles macroscopiques pour la dynamique du polymère dans un écoulement.

En effet, pour construire un modèle macroscopique, il faut commencer avec un modèle microscopique de comportement des polymères.

3.2 Propriété générale d'un polymère

3.2.1 Propriété chimique d'un polymère

Les polymères sont en général des macro-molécules à base de longues chaînes de monomères constitués de nombreuses sous-unités qui se connectent par des liaisons de covalences. On distingue :

- les polymères synthétiques : polyéthylène (PE), polystyrène (PS), Polyvinyl chloride(PVC), ...
- les polymères naturels : ADN, protéine, fibre végétale, cellulose, ...

Dans le cas de polymères synthétiques, les monomères sont des produits chimiques de base qui peuvent subir une procédure de polymérisation. Par exemple,



FIGURE 3.1: Polymère de polyéthylène obtenu par polymérisation de N monomères d'éthylène. Le zoom permet d'identifier la répétition des monomères

le PE est obtenu par polymérisation de N monomères d'éthylène $CH_2 = CH_2$ suivant la formule :

$$N. (CH_2 = CH_2) \to H - (CH_2 - CH_2)_N - H$$
(3.1)

cette formule est illustrée figure 3.1.

Notons que dans le cas des polymères naturels, les monomères sont plus compliqués et les polymères ne sont pas nécessairement périodiques.

Parmi les liaisons de covalences, la liaison Carbone-Carbone est la plus résistante et la plus présente dans les polymères synthétisés. Par ailleurs, il existe également des liaisons covalence Carbone-Oxygène, Carbone- Nitrogène, Nitrogène-Oxygène, etc, ...

Dans cette thèse nous nous intéressons aux polymères synthétisés qui se composent des liaisons Carbone-Carbone. Dans ce cas, un paramètre important est le degré de polymérisation N, qui est le nombre de monomères moyens qui sont associés pour former un polymère. Une longue chaîne de polymère est plus fragile et donc plus difficile à fabriquer. Notre technologie permet d'atteindre des valeurs de N assez grandes, par exemple $N = 10^5$ pour le UHMPE (polyéthylène de haute densité). Lors de la production des polymères, une des difficultés est la connaissance et le contrôle de la valeur moyenne de N après production.

Lors de la synthèse des polymères, il est possible d'avoir des anomalies de branchement qui conduisent à des géométries non linéaires. En effet, le Carbone peut former au plus 4 liaisons de covalence avec les autres particules. Pour un

CHAPITRE 3. DYNAMIQUE DES POLYMÈRES



FIGURE 3.2: Différents branchements typiques des polymères pour des liaisons Carbone-Carbone

atome Carbone au milieu de la chaîne, il peut y avoir 3 possibilités pour connecter cet atome aux autres atomes de Carbone :

- -2 liaisons de covalence utilisées : c'est une chaîne linéaire (figure 3.2a).
- -3 liaisons de covalence utilisées : cet ensemble devient un noeud avec 3 branches (exemple typique sur la figure 3.2 b et c).
- 4 liaisons de covalences sont utilisées : ce cas existe mais est extrêmement rare et instable car ce sont 4 grosses branches qui se connectent à un seul atome de carbone et vont se repousser entre elles(exemple typique sur la figure 3.2 d).

Par ailleurs, il existe d'autres types de branchements [37] que b) c) et d) de la figure 3.2 qui aboutissent à des géométries plus complexes (réseau 3D par réticulation chimique, ...), en particulier pour d'autres types de liaisons que la liaison Carbone-Carbone comme par exemple pour la vulcanisation des élastomères par le soufre. Mais tous les branchements peuvent se décomposer en des branches linéaires. Nous nous limitons à une configuration la plus simple où les chaînes de polymères sont linéaires.

3.2.2 Conformation et flexibilité

Comment bouge une chaîne de polymère? Il y a deux types de mouvements sur une liaison :

— A petite échelle il y a de petits mouvements de vibration (rota-

tion/translation) autour des configurations stables (puits de potentiel énergétique moléculaire).

— A plus grande échelle il y a des rotations importantes autours de l'axe de la liaison covalente qui transforme la **conformation** du polymère et donne au polymère la **flexibilité** macroscopique.

En effet, les conformations d'une molécule sont les arrangements des atomes qui ne se différencient que par des rotations autour de liaisons simples ¹. Sur une molécule simple comme l'éthane C_2H_6 , on observe que la rotation autour de l'axe C_1-C_2 fait varier l'énergie potentielle moléculaire (voir figure 3.3). Cette énergie potentielle est calculée à partir de la structure électronique d'un système à plusieurs noyaux et électrons (équation de Kohn-Sham [39]). Les minimums locaux (puits de potentiel énergétique moléculaire) sont obtenus pour les angles $\varphi = 60+120n$ (configuration décalé) avec n = 0, 1, 2. Les maximas locaux sont obtenus pour les angles $\varphi = 120n$ (configuration éclipsée).

Dans le cas d'un polymère avec des liaisons Carbone-Carbone comme par exemple le polyéthylène [9], les longueurs des liaisons $a \approx 0.15nm$ et l'angle entre les liaisons $\theta \approx \arccos(-1/3) = 109.47$ sont à peu près constants (voir figure 3.4) : à température ordinaire, leurs amplitudes oscillent de 3%. Par contre, l'énergie potentielle dépend des angles aléatoires successifs φ (voir figure 3.4c). Or localement, lorsque φ varie, il y 3 minimum d'énergie qui correspondent à 3 conformations principales qui sont nommées trans t et gauche g où on distingue g+ et g- (voir figure 3.4). On distingue alors 2 types de flexibilités :

- 1) Flexibilité statique : lorsqu'on a une distribution spatiale des différentes conformations principales t, g+, g-, si l'agitation thermique $k_B.T$ (avec k_B la constante de Boltzmann) est plus grande que la différence d'énergie entre les conformations trans et gauche noté $\Delta \varepsilon$ (voir figure 3.4b) soit $k_B.T > \Delta \varepsilon$, alors toutes les conformations principales t, g+ et g- sont probables localement. Le polymère apparaît comme une pelote aléatoire (statistiquement flexible). Pour de plus grandes valeurs de $\Delta \varepsilon$ si $k_B.T < \Delta \varepsilon$, alors il est moins probable de trouver les conformations g+ et g-, et il est plus probable de trouver la conformation t, la chaîne apparaîtra plus rigide et plus linéaire.
- 2) Flexibilité dynamique : Si localement, la chaîne change de conformation au cours du temps, alors il faut franchir la barrière de potentiel ΔE à l'aide de l'agitation thermique ou des effets quantiques (voir figure 3.4b). Si l'agitation thermique $k_B.T$ est plus grande que la barrière énergétique $k_B.T > \Delta E$, alors, il est tout le temps possible de passer d'une conformation à une autre. La chaîne apparaît extrêmement flexible au cour du temps, et le temps de relaxation est très faible. Par contre, si $k_B.T < \Delta E$, il est moins probable de passer d'une conformation à une autre, la chaîne apparaîtra moins flexible au cours du temps.

Les deux notions ne se recouvrent pas forcément. En effet, nous pouvons trouver des molécules flexibles du point de vue statique mais non flexibles du point de vue dynamique (la barrière ΔE est très élevée) : le polymère apparait comme une

^{1.} Le passage d'une conformation à une autre ne nécessite pas de casser la liaison chimique contrairement aux configurations des molécules comme par exemple les molécules chirales qui ont une barrière énergétique beaucoup plus élevée



FIGURE 3.3: Conformation de la molécule d'éthane. a) Molécule d'éthane. b) Vue 3D. c) Vue suivant l'axe de liaison C1 - C2. d) Evolution du potentiel énergétique moléculaire en fonction de l'angle de rotation φ , résultat de la simulation du logiciel libre Ghemical[1]

pelote aléatoire qui est figée dans une conformation (comme un fil de fer tordu). Dans cette thèse on ne discutera pas de ce type de molécule.



FIGURE 3.4: Example de conformation d'un polymère. a) Vue 3D et torson φ du polymère autour de l'axe C1-C2. b) Variation d'énergie potentielle moléculaire en fontion de l'ange de torsion φ (Résultat de simulations par le logiciel Ghemical[1]). c) Zoom sur la liaison C1-C2, en différentes conformations principales. d) Projection Newman. e) Schéma d'une partie de la chaîne de carbone du squelette du polyéthylène

3.3 Modélisation d'un polymère par une chaîne idéale

3.3.1 Marche aléatoire et distribution Gaussienne



FIGURE 3.5: Schéma du squelette du polymère modélisé par une marche aléatoire (voir la notation dans le texte)

La chaîne idéale est décrite par une marche aléatoire généralisée où on impose :

- H1 l'orientation des liaisons des atomes du squelette comme statiquement indépendant.
- **H2** la loi de distribution de l'orientation est la même pour tous les monomères et est isotrope (donc de moyenne nulle).
- **H3** la longueur de liaison est fixée et égale à a

La conséquence de ces hypothèses pour une telle chaîne est que toutes les conformations sont équiprobables, et ont donc une même énergie potentielle moléculaire : la chaîne idéale est à énergie potentielle moléculaire constante quelque soit la conformation. Cela correspond au cas des chaînes statiquement flexibles (voir section 3.2.2).

On a représenté la chaîne idéale sur le schéma 3.5, avec :

- 1. les N atomes du squelette notés C1, C2, ..., CN
- 2. les N positions des atomes notés $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}$ qui sont des variables aléatoires.
- 3. les N vecteurs de liaison $r^{(1)} = x^{(2)} x^{(1)}, \dots, r^{(N-1)} = x^{(N)} x^{(N-1)}$. En suivant l'hypothèse H1, on a statistiquement, :

avec l'hypothèse H2 :
$$\langle \boldsymbol{r}^{(i)} \rangle = 0$$
 (3.2)

avec l'hypothèse H1 et H3 :
$$\langle \boldsymbol{r}^{(i)}, \boldsymbol{r}^{(j)} \rangle = a^2 \delta_{ij}$$
 (3.3)

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Le vecteur bout à bout entre 2 extrémités d'un polymère est noté \mathbf{R} , il vaut :

$$\mathbf{R} = \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{r}^{(n)} \tag{3.4}$$

Avec le résultat (3.3), on en déduit la variance du vecteur bout à bout :

$$\langle \mathbf{R}^2 \rangle = \sum_{i,j} \langle \mathbf{r}^{(i)} \cdot \mathbf{r}^{(j)} \rangle = \sum_i \langle (\mathbf{r}^{(i)})^2 \rangle = Na^2$$
 (3.5)

On note $P(\mathbf{R})$ la probabilité d'avoir un vecteur bout à bout \mathbf{R} et R_0 la variance de $\mathbf{R} : R_0 = \sqrt{\langle \mathbf{R}^2 \rangle}$. Avec l'hypothèse de la chaîne idéale, nous pouvons appliquer le théorème central limite sur la somme des vecteurs de liaisons. Le vecteur \mathbf{R} doit donc suivre une loi normale quand N est assez grande. Cette loi est donnée par :

$$P(\mathbf{R}) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi N a^2}\right)^3} exp\left(-\frac{3\mathbf{R}^2}{2Na^2}\right)$$
(3.6)

Où le facteur 3 dans l'équation 3.6 provient du fait que nous utilisons des vecteurs aléatoires en 3 dimensions.

Remarques :

- Le vecteur bout à bout le plus probable est le vecteur nul.
- L'hypothèse H1 implique que la chaîne de polymères peut se replier sur elle-même, donc le modèle de chaîne idéale est également appelé le modèle de chaîne fantôme.
- La distribution $P(\mathbf{R})$ est isotrope : elle ne dépend pas de la direction du vecteur \mathbf{R} , mais ne dépend que de la norme $R = |\mathbf{R}|$.
- Grâce au théorème central limite, la loi de distribution de R est indépendante de l'orientation des vecteurs r. Par exemple Orr [52] introduit en 1947 un processus de marche aléatoire simplifiée en réseau 2D où les orientations possibles sont "droit-gauche-haut-bas".

3.3.2 Amélioration du modèle

Nous sommes toujours à la recherche d'une modélisation plus réaliste des polymères que la marche aléatoire avec une distribution Gaussienne du paragraphe 3.3.1. Nous pouvons construire des modèles avec des hypothèses moins fortes :

H1' Au lieu de hypothèse H1: nous pouvons introduire une dépendance entre les vecteurs d'orientation :

$$\gamma_{ij} = \left\langle r^{(i)} r^{(j)} \right\rangle \neq 0 \tag{3.7}$$

où γ est une corrélation qui décroit de manière exponentielle avec la distance i-j



FIGURE 3.6: L'allure de la distribution de probablité normalisé (noté Φ) en fonction de l'étirement normalisé $x = \frac{R}{R_F}$. Image tiré du livre de De Gennes [20]

- **H2'** Au lieu de considérer la distribution des orientations de manière isotrope, nous pouvons considérer des angles d'orientation θ et φ comme décrit dans la partie 3.2.1, et donner une distribution de probabilité de φ qui privilégie le puits d'énergie potentielle (position "trans").
- **H3** Cette hypothèse est réaliste car la distance entre 2 atomes Carbone dans une chaîne de polymères est à peu près constante.

Avec les hypothèse de H1' et H2', Flory [29] montre que nous retrouvons un comportement de chaînes idéales avec le nombre de monomère N très grand. Néanmoins, pour les chaînes qui se replient fortement, alors des monomères i et j peuvent être éloignés dans la chaîne mais proches spatialement.

Dans ce cas, il faut changer la loi de distribution P(R). Il existe 2 techniques pour calculer la loi de probabilité (PDF) en prenant en compte les interactions spatiales entre les monomères :

- Nous nous donnons un nombre N limité et listons toutes les conformations possibles, nous faisons enfin un raisonnement asymptotique quand $N \to \infty$.
- Nous nous donnons un nombre N très grand et faisons des simulations de type Monte-Carlos pour calculer la PDF.

La PDF de R prend alors la forme générale suivante [46] :

$$P(R) = \frac{1}{(R_F)^D} \varphi_p\left(\frac{R}{R_F}\right)$$
(3.8)

où D est le nombre de dimension $(D = 3 \text{ pour le cas 3D}), \frac{1}{(R_F)^D}$ est un pré-facteur pour assurer que $\int_{0}^{\infty} p(R) dR = 1$. R_F est une échelle caractéristique des polymères, qui est introduite par Flory :

$$R_F = a N^{3/5} (3.9)$$

L'allure de la fonction $\varphi_P(\frac{R}{R_F})$ est présentée dans la figure 3.6. Elle a 2 com-

portements asymptotiques différents quand $R \to 0$ et quand $R \to \infty$:

$$\lim_{\frac{R}{R_F} \to 0} \varphi_P\left(\frac{R}{R_F}\right) \sim \left(\frac{R}{R_F}\right)^g \tag{3.10}$$

$$\lim_{\frac{R}{R_F}\to\infty}\varphi_P\left(\frac{R}{R_F}\right)\sim exp\left(-\left(\frac{R}{R_F}\right)^{\delta}\right)$$
(3.11)

Nous remarquons que :

- Les exposants q et δ sont déterminés dans l'espace 3D par : $q \approx 1/3$ et $\delta = 5/2$, or la distribution Gaussienne a un exposant δ de 2.
- Nous remarquons également que : si R suit la loi de distribution de Flory (equation 3.8), sa variance vaut $R_F^2 = a^2 N^{6/5}$, or la distribution Gaussienne donne une variance Na^2 . Avec R_0 est la racine carrée de la variance $R_0 =$ $\sqrt{\langle \mathbf{R}^2 \rangle}$, on a :
 - $R_0 = aN^{1/2}$ si nous considérons une distribution Gaussienne $R_0 = aN^{3/5}$ si nous considérons la distribution de Flory

3.3.3Entropie et loi de Hooke du polymère

On associe à un vecteur bout à bout \mathbf{R} donné, un macro-état. Or pour un vecteur **R** donné, il y a plusieurs conformations possibles de $\mathbf{r}^{(i)}$ avec i = 1, ..., N: chaque conformation forme un micro état. Donc pour un macro état **R**, on définit $\Omega(\mathbf{R})$ le nombre de ses micro-états possibles. Comme chaque conformation est équiprobable (voir paragraphe 3.3.1), alors les micro-états sont équiprobables, et on définit l'entropie du polymère par :

$$S(\mathbf{R}) = k_B \log(\Omega(\mathbf{R})) \tag{3.12}$$

Or, pour un vecteur bout à bout fixé \mathbf{R} , $\Omega(\mathbf{R})$ est directement proportionnel à la probabilité $P(\mathbf{R})$ d'avoir un macro-état, donc :

$$\Omega(\mathbf{R}) = C_1 \ P(\mathbf{R}) \tag{3.13}$$

avec C_1 est une constante. Avec (3.12) et (3.13), on a :

 $S(\mathbf{R}) = k_B \log(P(\mathbf{R})) + C_2$ avec $C_2 = k_B \log(C_1)$ (3.14)

$$S(\mathbf{R}) = C_3 - \frac{3 k_B \mathbf{R}^2}{2R_0^2} \qquad \text{avec } C_3 = C_2 + \log\left(\frac{3}{2\pi R_0^2}\right) \qquad (3.15)$$

Si un opérateur agit sur le vecteur bout à bout \mathbf{R} de manière quasi-statique (infiniment lente), alors en augmentant la longueur de **R**, l'entropie du polymère diminue. Si l'entropie diminue, alors l'opérateur lutte contre le "désordre naturel" (second principe) et il "sent" une résistance à sa force. Plus exactement, lors de la transformation qui passe du macro-état \mathbf{R} au macro-état $\mathbf{R} + d\mathbf{R}$, nous supposons que :

1. La chaîne est idéale, donc l'énergie potentielle est constante (i.e U = constante) au cours de la transformation, donc on a :

$$0 = dU = \delta W + \delta Q \tag{3.16}$$

avec δW et δQ sont respectivement le travail mécanique et la chaleur échangée avec l'opérateur.

- 2. la transformation est quasi-statique, i.e infiniment lente, le système passe par une série d'équilibres thermodynamiques des macro-états, ce qui a deux conséquences :
 - a) la chaleur reçue par le polymère durant la transformation est liée par l'entropie par

$$\delta Q = TdS \tag{3.17}$$

avec T la température de la chaîne

b) lors de la transformation infiniment lente, la force de l'opérateur sur le polymère \mathbf{F}_{op} est opposée à la force de rappelle exercée par le polymère sur l'opérateur \mathbf{F}_R ($\mathbf{F}_{op} = -\mathbf{F}_R$). On a :

$$\delta W = \mathbf{F}_{op} d\mathbf{R} = -\mathbf{F}_R d\mathbf{R} \tag{3.18}$$

Avec l'équation (3.16), (3.17), (3.18), il est possible de calculer l'expression de la force de relaxation de la chaîne en transformant le macro-état **R** vers le macro-état **R** + d**R** :

$$\mathbf{F} = T \frac{dS(\mathbf{R})}{d\mathbf{R}} = -\frac{3Tk_B}{R_0^2} \mathbf{R}$$
(3.19)

Le polymère agit comme un **ressort** (ressort entropique) qui suit la loi de Hooke $\mathbf{F} = -K\mathbf{R}$ avec la raideur $K = \frac{3Tk_B}{R_0^2}$

Attention, dans les modèles prenant en compte l'effet des interactions spatiales (modèle de Flory), l'équation (3.12) est toujours valide, mais l'exposant de \mathbf{R} dans l'équation (3.15) n'est plus 2 mais prend une nouvelle valeur 5/2 (dans le cas 3D). Cela conduit à la force de rappel qui n'est pas linéaire par rapport à \mathbf{R} , et donc la raideur K devient une fonction de l'extension. Dans ce travail, par raison de simplification, nous utilisons le modèle chaîne idéale.

3.3.4 Chaîne Gaussienne et chaîne FENE

Le même raisonnement qu'en parties 3.3.1 et 3.3.3 peut être appliqué à un sous-groupe de N' monomères du polymère contenant N monomères au total, si le nombre N' est assez grand. On construit le modèle de **chaîne Gaussienne** en représentant chaque sous-groupe de monomères par un centre de masse ponctuelle (appelé "bead") relié aux autres centres de masse par des ressorts de Hooke de raideur constante :

$$K_G = \frac{3Tk_B}{N'a^2} \tag{3.20}$$

Au total, il y a une succession de M = N/N' ressorts. Le processus est décrit dans la figure 3.3.4. Ce type de d'approche "coarse-grained" peut être utilisée dans les modèles microscopiques (voir Bird et al.[10]).



FIGURE 3.7: Schéma illustrant la modélisation d'un polymère par une chaîne Gaussienne constituée des ressorts entropiques : a) polymère, b) subdivision en M = 10 sous groupe de monomères, c) remplacement des sous groupes par des ressorts entropiques

Warner [85] introduit une limite d'extension du polymère R_{max} et une correction non linéaire sur la raideur(empirique) \mathcal{P} :

$$K_{FENE}(\mathbf{R}) = K_G \mathcal{P}(\mathbf{R}) \tag{3.21}$$

où

$$\mathcal{P}(\mathbf{R}) = \frac{1}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|^2}{R_{max}^2}\right)} = \frac{R_{max}^2}{R_{max}^2 - |\mathbf{R}|^2}$$
(3.22)

Ce modèle est également appelé **chaîne FENE** (Finite Extensible Nonlinear Elastic). La raideur du ressort dans le modèle FENE ($K_{FENE}(\mathbf{R})$) dépend de la longueur du vecteur bout à bout \mathbf{R} et de la limite R_{max} : elle tend vers l'infini quand \mathbf{R} tend vers la limite R_{max} . Par ailleurs il existe d'autres modèles pour le comportement non linéaire de la raideur comme les modèles de Fraenkel ou de Tanner [10]). On remarque que pour R_{max} tend vers l'infini, on a :

$$\lim_{R_{max}\to\infty} \mathcal{P}(\mathbf{R}) = 1 \quad \forall \mathbf{R}, \tag{3.23}$$

donc la chaîne FENE devient une chaîne Gaussienne.

L'énergie potentielle élastique qui dérive la force de relaxation dans chaque modèle est :

Chaîne Gaussienne :
$$e_p = \frac{1}{2} K_G \mathbf{R}^2$$
 (3.24)

Chaîne FENE :
$$e_p = \frac{1}{2} K_G R_{max}^2 ln(\mathcal{P}(\mathbf{R}))$$
 (3.25)

Les deux énergies sont égales lorsque l'étirement est faible $\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}} \ll 1$. En effet, par un développement de Taylor on a : $ln\mathcal{P}(\mathbf{R}) \simeq \frac{\mathbf{R}^2}{R_{max}^2} + \dots$

3.4 Interaction polymère-polymère

Dans la partie précédente, nous avons vu les propriétés dynamiques d'une seule chaîne. A faible concentration de monomères c, il n'y a quasiment pas d'interactions entre les polymères, ce n'est plus le cas avec les plus fortes concentrations. On définit une concentration de recouvrement c^* telle que les polymères arrivent les uns sur les autres, se touchent sans s'interpénétrer (voir figure 3.8b).



FIGURE 3.8: Les différentes régimes (source : De Gennes[20] : a)dilués, b) limite entre 2 régimes et c) semi-dilués

- Si $c < c^*$, nous avons un régime dilué, il n'y a quasiment pas d'interactions entre les polymères (voir figure 3.8a).
- Si $c > c^*$, les polymères commencent à s'enchevêtrer, c'est le début du régime "semi dilué" (voir figure 3.8c)
- Si $c >> c^*$, c'est le régime concentré ou polymère fondu.

La concentration c^* est donnée par [20] :

$$c^{\star} \simeq a^{-3} N^{-4/5} \tag{3.26}$$

Dans cette thèse, nous nous situons dans le régime dilué : $(c < c^*)$. A titre exemple, $c^* \approx 200$ pour la solution de polyacrylamide [42]

3.5 Modèle microscopique du polymère dans un écoulement

Dans les parties précédentes, nous avons établi des propriétés de polymères à partir de l'équilibre statique. Dans cette partie, nous nous intéressons aux propriétés dynamiques des polymères quand ils sont déformés par le solvant. Par ailleurs, le polymère effectue un effort de réaction sur l'écoulement porteur. Cet effet de couplage crée des effets spectaculaires : la réduction de traînée, la modification de viscosité apparente quand les fluides subissent un cisaillement ("shear thining"), l'effort normal qui apparaît en cisaillement pur, modification de la forme de la surface libre ("rod climbing effect" ou Weissenberg effet)...

A cause de la séparation énorme entre les échelles des polymères et les échelles des fluides, les simulations numériques ne peuvent pas prendre en compte toutes les échelles du fluide et du polymère en même temps. C'est pourquoi il existe plusieurs modèles rhéologiques divisés en 3 familles de modèles basés sur 3 approches différentes :

- L'approche microscopique qui simule un mouvement Brownien des polymères en utilisant les equations de Langevin.
- L'approche probabilistique avec l'équation de Fokker-Planck
- L'approche macroscopique des polymères avec une équation Eulérienne sur la conformation des polymères.

Cette section va présenter les modèles macroscopiques utilisés dans cette thèse pour la simulation. Néanmoins dans un premier temps nous présentons une approche microscopique qui permet de construire un modèle macroscopique dans un deuxième temps.

3.5.1 Modèle de Langevin pour une particule



FIGURE 3.9: Schéma illustrant les différentes forces exercées sur une particule

On considère une très petite particule immergée dans un fluide : il subit une agitation thermique et un frottement du à l'écoulement porteur. Le bilan des forces s'écrit

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_B \tag{3.27}$$

Avec :

- m est la masse de la particule
- La vitesse de la particule $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{X}}{dt}$, et \mathbf{X} sa position
- La force de frottement due à l'écoulement porteur sur la particule $\mathbf{F}_D = \zeta(\mathbf{u} \mathbf{v})$ où \mathbf{u} est la vitesse de l'écoulement porteur autour de la particule, ζ est le coefficient de frottement qui vaut $\zeta = 3\pi\mu d$ (la particule est considéré comme une sphère de diamètre d, et μ est la viscosité dynamique de l'écoulement porteur). A premier approximation, nous pouvons prendre $d = 2R_0$
- \mathbf{F}_B représente l'agitation thermique, qui est une force aléatoire indépendante à tous les instants telle que $\langle \mathbf{F}_B(t) \rangle = 0$. Sa fonction de corrélation

s'écrit :

$$\langle (F_B)_i(t).(F_B)_j(t') \rangle = \sigma_B^2 \delta_{ij} \delta(t - t')$$
(3.28)

Où δ_{ij} est le symbole de Kronecker et δ est la distribution de Dirac. Pour déterminer σ_B , on considère le cas de l'agitation thermique pure, sans vitesse de l'écoulement porteur ($\mathbf{u} = 0$). A l'équilibre, on a l'équation (3.29) :

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \zeta \mathbf{v} + \mathbf{F}_B \tag{3.29}$$

En intégrant, on obtient :

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0)e^{-\frac{\zeta}{m}t} + \frac{1}{m}\int_0^t e^{-\frac{\zeta}{m}(t-\tau)}\mathbf{F}_B(\tau)d\tau$$
(3.30)

La corrélation vaut :

$$\langle \mathbf{v}(t).\mathbf{v}(t)\rangle = \mathbf{v}(0)^2 e^{-2\frac{\zeta}{m}t} + \frac{1}{m^2} \int_0^t \left(\int_0^t e^{-\frac{\zeta}{m}(2t-\tau-\tau')} \underbrace{\langle \mathbf{F}_B(\tau).\mathbf{F}_B(\tau')\rangle}_{=3\sigma_B^2\delta(\tau-\tau')} d\tau \right) d\tau$$
(3.31)

$$= \mathbf{v}(0)^2 e^{-2\frac{\zeta}{m}t} + \frac{1}{m^2} \int_0^t e^{-\frac{\zeta}{m}(2t-2\tau')} 3\sigma_B^2 d\tau'$$
(3.32)

$$= \mathbf{v}(0)^{2} e^{-2\frac{\zeta}{m}t} + \frac{3}{2\zeta m} \sigma_{B}^{2} \left(1 - e^{-2\frac{\zeta}{m}t}\right)$$
(3.33)

donc l'énergie relaxe à grand temps (donc à l'équilibre) vers

$$\left< \mathbf{v}^2 \right> = \frac{3}{2\zeta m} \sigma_B^2 \tag{3.34}$$

Or le théorème d'équipartition d'énergie de la physique statistique classique nous indique que $m_{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{v}^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T$ (en 3 dimensions). Finalement, on obtient : $\sigma_B^2 = 2k_B T \zeta$. On note donc l'agitation thermique sous la forme

$$\mathbf{F}_B = \sqrt{2k_B T \zeta} \dot{\mathbf{W}}(t) \tag{3.35}$$

Avec \boldsymbol{W} est un processus de Wiener. Cette force \mathbf{F}_B peut être approchée numériquement par $\sqrt{\frac{2k_B T\zeta}{\Delta t}}\mathbf{n}$ où \mathbf{n} est un vecteur aléatoire Gaussien (dont chaque composante suit une loi de distribution Gaussienne normalisée).

3.5.2 Modèle de FENE-M et Rousse pour un polymère

Pour construire le modèle de Langevin pour les polymères, on se base sur le modèle de la chaîne FENE ou Gaussienne divisée en M sous groupes, le solvant joue alors le rôle de thermostat (agitateur). Voir la figure 3.10. On effectue le bilan des forces sur le *m*-ième centre de masse de la chaîne positionnée en $\mathbf{X}^{(m)}$:

$$m\frac{d\mathbf{v}^{(m)}}{dt} = \mathbf{F}_D^{(m)} + \mathbf{F}_B^{(m)} + \mathbf{F}_R^{(m)} - \mathbf{F}_R^{(m-1)}$$
(3.36)

Avec :



FIGURE 3.10: Schéma illustrant les différentes forces exercées sur un sous-groupe de monomères (voir texte ci-dessous pour l'expliquation des termes)

- m est la masse d'un groupe de monomères.
 La vitesse du centre de masse v^(m) = dX^(m)/dt, et X^(m) sa position
 La force de frottement due à l'écoulement porteur sur le groupe de monomère F^(m)_D = ζ(u^(m) v^(m)) avec u^(m) est la vitesse de l'écoulement porteur.
- $\mathbf{F}_{B}^{(m)} = \sqrt{2k_{B}T\zeta} \dot{\boldsymbol{W}}^{(m)}$ représente l'agitation thermique, qui est une force aléatoire indépendante à tous les instants.
- $\mathbf{F}_{R}^{(m)}$ est la force du ressort que le *m*-ième centre de masse exerce sur le m-1-ième centre de masse, et $-\mathbf{F}_R^{(m)}$ est la force réciproque. L'expression de cette force a été discutée dans la partie 3.3.4, que l'on rappelle ici :

$$\mathbf{F}_{R}^{(m)} = K_{G} \mathcal{P}(\mathbf{R}) \mathbf{R}^{(m)} = K_{G} \mathcal{P}(\mathbf{R}) (\mathbf{X}^{(m+1)} - \mathbf{X}^{(m)})$$
(3.37)

Dans les modèles microscopiques, l'accélération est négligée : les centres de masse respectent toujours l'équilibre des forces. L'équilibre du m-ième centre de masse s'écrit :

$$\mathbf{F}_{R}^{(m)} - \mathbf{F}_{R}^{(m-1)} + \mathbf{F}_{D}^{(m)} + \mathbf{F}_{B} = \mathbf{0}$$
(3.38)

En remplaçant l'expression des forces dans (3.38), nous avons ainsi l'équation finale :

$$\frac{d\mathbf{X}^{(m)}}{dt} = \mathbf{u}^{(m)} + \frac{K_G}{\zeta} \mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m)}|) \mathbf{R}^{(m)} - \frac{K_G}{\zeta} \mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m)}|) \mathbf{R}^{(m-1)} + \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta}} \dot{\boldsymbol{W}}^{(m)}(t)$$
(3.39)

La dynamique du vecteur qui relie 2 centres de masse suit l'équation :

$$\frac{d\mathbf{R}^{(m)}}{dt} = \frac{d\mathbf{X}^{(m+1)}}{dt} - \frac{d\mathbf{X}^{(m)}}{dt} = (\mathbf{u}^{(m+1)} - \mathbf{u}^{(m)}) \\
+ \frac{K_G}{\zeta} \left(\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m+1)}|)\mathbf{R}^{(m+1)} + \mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m-1)}|)\mathbf{R}^{(m-1)} - 2\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m)}|)\mathbf{R}^{(m)} \right) \\
+ \sqrt{\frac{2k_BT}{\zeta}} \left(\dot{\boldsymbol{W}}^{(m+1)}(t) - \dot{\boldsymbol{W}}^{(m-1)}(t) \right) \quad (3.40)$$

Dans le cas de la chaîne Gaussienne ($\mathcal{P} = 1$), le modèle est connu sous le nom de "modèle de Rousse"[65]. Dans le cas contraire, c'est le modèle FENE(-M) où M représente le nombre de chaînes utilisées [68, 11]. Il existe également d'autres modèles, par exemple le modèle de Zimm qui prend en compte les interactions internes de la chaîne [91].

Si nous considérons que les échelles du polymère sont beaucoup plus faibles que l'échelle de l'écoulement, alors les 2 centres de masse sont très rapprochés, et la différence $\mathbf{u}^{(m+1)} - \mathbf{u}^{(m)}$ peut être approchée par un développement de Taylor du premier ordre :

$$\mathbf{u}^{(m+1)} - \mathbf{u}^{(m)} = \mathbf{R}^{(m)} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(m)}$$
(3.41)

En remplaçant l'équation (3.41) dans l'équation (3.40), nous obtenons l'équation gouvernant l'extension du polymère :

$$\frac{d\mathbf{R}^{(m)}}{dt} = \mathbf{R}^{(m)} \cdot \nabla \mathbf{u}^{(m)} + \sqrt{\frac{2k_BT}{\zeta}} \left(\dot{\boldsymbol{W}}^{(m+1)}(t) - \dot{\boldsymbol{W}}^{(m-1)}(t) \right) \\
+ \frac{K_G}{\zeta} \left(\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m+1)}|) \mathbf{R}^{(m+1)} + \mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m-1)}|) \mathbf{R}^{(m-1)} - 2\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m)}|) \mathbf{R}^{(m)} \right) \quad (3.42)$$

3.5.3 L'effort créé par le polymère

Par le principe de l'action et réaction de Newton, la force que le centre de masse du polymère exerce sur l'écoulement porteur est l'opposée de la somme de la force de traînée \mathbf{F}_D et de la force Brownienne \mathbf{F}_B . Cette somme s'équilibre avec les forces internes du polymère suivant l'équation 3.38, nous avons finalement, la force que chaque centre de masse du polymère exerce sur l'écoulement porteur est égale à la force interne du polymère :

$$\mathbf{F}_{P} = \frac{K_{G}}{\zeta} \left(\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m+1)}|)\mathbf{R}^{(m+1)} + \mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m-1)}|)\mathbf{R}^{(m-1)} - 2\mathcal{P}(|\mathbf{R}^{(m)}|)\mathbf{R}^{(m)} \right) \quad (3.43)$$

La force totale des polymères est la résultante des forces de tous les polymères présents, donc cette force est proportionnelle à la concentration. En raison du coût de calcul, les simulations numériques ne peuvent pas simuler des quantités réalistes de chaîne FENE. Watanabe et Gotoh[87] ont contourné le problème en considérant que chaque chaîne représente x polymères tout en vérifiant que le facteur x n'a pas d'influence sur les résultats finaux.



3.5.3.1 Modèle d'haltères ou Dumbell model

FIGURE 3.11: Schéma illustrant les différentes forces pour le modèle d'haltères (voir texte ci-dessous pour les expliquations des termes)

Le modèle d'haltères ou "Dumbell model", est construit pour N = 2 c'est à dire avec 1 seul ressort. En comparant différents valeurs de M de modèle FENE-M, Watanabe et Gotoh [87] ont montré que le modèle FENE pour M = 2 est suffisant pour décrire les statistiques des polymères. Dans ce cas, le vecteur bout à bout $\mathbf{R} = \sum_m \mathbf{R}^{(m)} = \mathbf{R}^{(1)}$, et l'équation (3.42) deviennent :

$$\zeta \frac{d\mathbf{X}^{(1)}}{dt} = \zeta \mathbf{u}^{(1)} + K_G \mathcal{P}(|\mathbf{R}|) \mathbf{R} + \sqrt{2\zeta k_B T} \dot{\boldsymbol{W}}^{(1)}$$
(3.44)

$$\zeta \frac{d\mathbf{X}^{(2)}}{dt} = \zeta \mathbf{u}^{(2)} - K_G \mathcal{P}(|\mathbf{R}|)\mathbf{R} + \sqrt{2\zeta k_B T} \dot{\boldsymbol{W}}^{(2)}$$
(3.45)

La dynamique du vecteur bout à bout devient :

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{2K_G}{\zeta} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|)\mathbf{R} + \sqrt{\frac{2k_BT}{\zeta}} \left(\dot{\boldsymbol{W}}^{(2)} - \dot{\boldsymbol{W}}^{(1)}\right) \quad (3.46)$$

L'addition ou la soustraction des 2 processus aléatoires $\boldsymbol{W}^{(2)} - \boldsymbol{W}^{(1)}$ est un autre processus aléatoire (que nous notons $\sqrt{2}\boldsymbol{W}$, où le facteur $\sqrt{2}$ permet d'assurer que la variance de la processus \boldsymbol{W} est la même avec $\boldsymbol{W}^{(1)}$ et $\boldsymbol{W}^{(2)}$). Nous avons donc l'équation (3.46) qui devient :

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{2K_G}{\zeta} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|)\mathbf{R} + \sqrt{\frac{4k_BT}{\zeta}} \left(\dot{\mathbf{W}}\right)$$
(3.47)

L'évaluation de l'effort que les polymères exercent sur l'écoulement porteur est similaire à la procédure décrite dans la section 3.5.3, mais avec N = 2. Les équations se simplifient :

— Effort du premier centre de masse : $\mathbf{F}_p^1 = \frac{1}{\tau_p} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|) \mathbf{R}$

— Effort du deuxième centre de masse : $\mathbf{F}_p^2 = -\frac{1}{\tau_p} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|) \mathbf{R}$ avec $\tau_p = \frac{\zeta}{2K_G}$

3.5.3.2 Signification physique des paramètres des modèles d'haltères

Pour comprendre les effets de chaque terme dans l'équation (3.47), il faut qu'on se place dans les configurations simplifiées où le fluide porteur est statique : $\mathbf{u} = 0$ et donc $\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0$, dans ce cas, le polymère n'est pas très étiré : $\mathcal{P} = 1$.

• Temps de relaxation : Si on enlève l'agitation thermique $\sqrt{\frac{4k_BT}{\zeta}}\dot{W}$, cela revient à étudier la dynamique d'une seule chaîne de polymère avec un étirement initial (sans écoulement porteur). Dans ce cas, le polymère subit un processus de relaxation décrit par :

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = -\frac{2K_G}{\zeta} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|)\mathbf{R}$$
(3.48)

donc la chaîne de polymères modélisée par **R** relaxe vers son état équilibre en suivant la loi $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(0)exp(-\frac{2tK_G}{\zeta})$. Le temps caractéristique de ce processus est appelé temps de relaxation.

$$\tau_p = \frac{\zeta}{2K_G} = \frac{6\pi\mu R_0}{2(3Tk_B/R_0^2)} = \frac{\pi\mu R_0^3}{Tk_B}$$
(3.49)

Pour les modèles avec plusieurs maillons (Modèle FENE-N avec N > 2, modèle de Rousse), il existe plusieurs temps de relaxation.

• Longueur d'équilibre : l'équation (3.47) est une équation de Langevin similaire mathématiquement à l'équation (3.29) où on remplace le couple $(m, \zeta, \sigma_B = \sqrt{2k_B.T.\zeta})$ par $(\zeta, 2K_G, \sigma_B = \sqrt{4k_B.T.\zeta})$. Donc, au temps long, en effectuant le raisonnement similaire pour obtenir la solution (3.34), on obtient :

$$\left\langle \mathbf{R}^2 \right\rangle = \frac{3k_B T}{K_G} = R_0^2 \tag{3.50}$$

En remplaçant K_G par son expression (voir 3.20), nous retrouvons la variance

$$R_0^2 = Na^2 (3.51)$$

 R_0 apparaît comme une longueur à l'équilibre du polymère. On note intensité normalisé de la force Brownienne par :

$$R_{\star} = \sqrt{\frac{4k_BT}{\zeta}} \tag{3.52}$$

qui a une dimension d'une longueur.

Avec ces deux grandeurs, l'équation (3.47) peut donc se réécrire comme :

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} - \frac{1}{\tau_p} \mathcal{P}(|\mathbf{R}|) \mathbf{R} + R_\star \left(\dot{\mathbf{W}}\right)$$
(3.53)

3.5.3.3 Conclusion

Les modèles FENE, Rousse, et haltères sont des modèle très proches de la réalité qui prennent en compte la déformation des polymères par le fluide porteur. Mais l'inconvénient est que la simulation implique un suivi individuel des polymères. Si le nombre de polymères est élevé, la simulation devient vite très chère en terme de temps de calcul. Dans la littérature récente (2013), Wantanabe and Gotoh [86]ont effectué les simulations les plus coûteuses en terme de calcul avec un nombre de polymères contenus dans tout le domaine de l'ordre de 10^5 à 10^9 . Or cela est encore loin des concentrations typiques.

3.6 Modèles macroscopiques du polymère dans un écoulement

L'approche microscopique, nous venons de le voir, propose une modélisation intuitivement très réaliste. Mais elle contient également des limites, la plus grande difficulté est le coût de calcul : le suivi des particules est difficile à paralléliser efficacement. Un autre inconvénient est que la taille des polymères (de l'ordre du micromètre) est souvent très petite par rapport aux échelles de la turbulence (qui peuvent être très variables). Dans les simulations microscopiques, il est nécessaire d'interpoler les champs de vitesse pour obtenir les vitesses de l'écoulement aux positions des centres de masse des polymères. Pour avoir une interpolation précise, il faut que la longueur de polymère soit assez "visible" par rapport à la structure de la maille. Des modèles macroscopiques sont alors nécessaires pour palier ce défaut. Nous présentons dans ce paragraphe les modèles macroscopiques que nous allons utiliser.

3.6.1 Equation gouvernant la dynamique du fluide porteur

Pour le fluide, on utilise une approche macroscopique Eulérienne. Dans ce cas, le fluide est gouverné par l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot \boldsymbol{S}$$
(3.54)

Avec S le tenseur des contraintes. On peut montrer [10] que le tenseur peut s'écrire :

$$\boldsymbol{S} = -p\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}_f + \boldsymbol{S}_p \tag{3.55}$$

Avec

• p est la pression

- Contrainte visqueuse $\mathbf{S}_f = 2\nu_f \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right)$
- Contrainte introduite par les polymères

$$(S_p)_{ij} = \sum_{m=1}^{M-1} n \left\langle \mathcal{P}K_G(\mathbf{R}) R_i^{(m)} R_j^{(m)} \right\rangle - (M-1) n k_B T \delta_{ij}$$
(3.56)

où n est le nombre de polymères par unité de volume, M est le nombre de maillons de la chaîne FENE ou du modèle de Rousse.

Peterlin^[56] propose une fermeture en faisant l'approximation suivante :

$$\left\langle \mathcal{P}(\mathbf{R})R_{i}^{(m)}R_{j}^{(m)}\right\rangle \simeq \mathcal{P}(\mathbf{R})\left\langle R_{i}^{(m)}R_{j}^{(m)}\right\rangle$$
 (3.57)

Pour fermer équation (3.54), il faut une équation sur le terme $\left\langle R_i^{(m)} R_j^{(m)} \right\rangle$

3.6.2 Tenseur de conformation

Si on se restreint au modèle FENE-2, grâce à l'équation 3.55, pour connaître l'action du polymère sur le fluide, il suffit de travailler avec le tenseur appelé **tenseur de conformation**

$$D_{ij} = \langle R_i R_j \rangle \tag{3.58}$$

Ce tenseur est **défini positif**. Il représente statistiquement les orientations privilégiées du vecteur bout à bout **R** (représentatif de la conformation du polymère cf. paragraphe 3.3.1). Comme ses valeurs propres sont positives, il est possible de représenter ce tenseur par un ellipsoïde 3D comme l'ellipsoïde de Lamé (pour le tenseur des contraintes) (voir figure 3.12) : les vecteurs propres définissent les directions des axes principaux de l'ellipse et les valeurs propres correspondantes définissent leurs longueurs. D'un point vue physique les valeurs propres du tenseur **D** représentent la probabilité de trouver des polymères dont les vecteurs bout à bout sont dans la direction des vecteurs propres. On distingue :

- la situation isotrope où toutes les directions sont équiprobables pour le vecteur **R** (sphère sur la figure 3.12 à gauche). On explique dans le prochain paragraphe, que le polymère au repos a un tenseur de conformation de la forme $\boldsymbol{D} = \frac{R_{\star}^2}{3} \boldsymbol{I}$.
- la situation anisotrope où une direction est plus probable que les autres (grand axe de l'ellipsoïde sur la figure 3.12 à droite)

Par cette construction, la trace du tenseur D est le moment d'ordre 2 de l'extension polymère :

$$D_{ii} = \langle R_i R_i \rangle = \left\langle |\mathbf{R}|^2 \right\rangle \tag{3.59}$$

La matrice D ainsi définie doit être, par construction, définie et positive.

D'après la relation (3.24) dans le paragraphe 3.3.4, l'énergie élastique par unité de volume emmagasinée par les polymères est proportionnelle à la trace du tenseur de conformation :

$$e_p \simeq \frac{1}{2} K_G \left\langle |\mathbf{R}|^2 \right\rangle = \frac{1}{2} K_G D_{nn} \tag{3.60}$$

dans le cas d'un faible étirement ($\mathcal{P} \simeq 1$).



FIGURE 3.12: Schémas illustrant la réprésentation du tenseur de conformation \mathbf{D} sous forme ellipsoïde). Les images des polymères sont tirées de Roiter et al [64]

3.6.3 Équation gouvernant la dynamique des polymères : modèle Oldroyd-B et FENE-P

On utilise l'approche macroscopique Eulérienne et continue des polymères. Il faut transformer un modèle microscopique (FENE-2) en un modèle macroscopique. Cela consiste à considérer une zone infinitésimale de l'espace, et à représenter par un point Eulérien un nombre important de polymères afin que les statistiques sur les polymères soit convergées. Pour fermer l'équation 3.54, il faut connaître le tenseur $D_{ij} = \langle R_i R_j \rangle$.

Les deux modèles les plus utilisés sont les modèles Oldroyd-B et FENE-P [10]. Ces modèles sont macroscopiques et sont des versions dérivées des modèles de Hooke et FENE-2.

Nous pouvons dériver les équations Oldroyd-B et FENE-P à partir de l'équation (3.53):

$$R_j \frac{dR_i}{dt} = R_j R_l \partial_l u_i - \frac{1}{\tau_p} \frac{R_i R_j}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}}\right)^2} + R_\star R_j \left(\dot{W}_i(t)\right)$$
(3.61)

$$R_i \frac{dR_j}{dt} = R_i R_l \partial_l u_j - \frac{1}{\tau_p} \frac{\dot{R_i} R_j}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}}\right)^2} + R_\star R_i \left(\dot{W_j}(t)\right)$$
(3.62)

En sommant les équations (3.61) et (3.62) et en prenant la moyenne, nous obtenons :

$$\frac{d\langle R_i R_j \rangle}{dt} = \langle R_i R_l \partial_l u_j \rangle + \langle R_j R_l \partial_l u_i \rangle - \left\langle \frac{1}{\tau_p} \frac{R_i R_j}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}}\right)^2} \right\rangle + R_\star \left(\left\langle R_j \dot{W}_i(t) \right\rangle + \left\langle R_i \dot{W}_j(t) \right\rangle \right) \quad (3.63)$$

Nous sommes toujours avec l'hypothèse que les échelles caractéristiques du polymère sont très faibles devant l'échelle caractéristique la plus petite du fluide.
Les moyennes $\langle R_i R_l \partial_l u_j \rangle$ et $\langle R_j R_l \partial_l u_i \rangle$ peuvent être prises dans une région où **u** est constante, la somme de ces deux termes donne alors :

$$\langle R_i R_l \partial_l u_j \rangle + \langle R_j R_l \partial_l u_i \rangle = \langle R_i R_l \rangle \,\partial_l u_j + \langle R_j R_l \rangle \,\partial_l u_i = C_{il} \partial_l u_j + C_{jl} \partial_l u_i \quad (3.64)$$

La somme $C_{il}\partial_l u_j + C_{jl}\partial_l u_i$ peut s'écrire sous forme tensorielle : $(\boldsymbol{C}\cdot\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T\cdot\boldsymbol{C})$.

L'équation (3.63) n'est pas fermée à cause du terme $\left\langle \frac{1}{\tau_p} \frac{R_i R_j}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}}\right)^2} \right\rangle$. La fermeture de Peterlin [57] consiste à faire l'approximation suivante :

$$\left\langle \frac{1}{\tau_p} \frac{R_i R_j}{1 - \left(\frac{|\mathbf{R}|}{R_{max}}\right)^2} \right\rangle \simeq \frac{1}{\tau_p} \frac{\langle R_i R_j \rangle}{1 - \frac{\langle |\mathbf{R}|^2 \rangle}{R_{max}^2}} = \frac{1}{\tau_p} \frac{D_{ij}}{1 - \frac{D_{in}}{R_{max}^2}}$$
(3.65)

Cette approximation devient exacte quand tous les polymères dans le volume considéré est étiré de la même manière. Nous pouvons noter le terme $\frac{1}{1-D_{nn}/L_{max}^2}$ par $\mathcal{P}(\mathbf{D})$, comme jouant le même rôle que le terme $\mathcal{P}(|\mathbf{R}|)$.

Il reste à évaluer les corrélations $\left\langle R_j \dot{W}_i(t) \right\rangle$ et $\left\langle R_i \dot{W}_j(t) \right\rangle$. Posons :

$$\frac{1}{\tau_p} D_{ij}^{\star} = R_{\star} \left(\langle R_j W_i(t) \rangle + \langle R_i W_j(t) \rangle \right)$$
(3.66)

L'équation (3.63) se réécrit en :

$$\frac{d\boldsymbol{D}}{dt} = \boldsymbol{D} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{D} - \frac{1}{\tau_p} \left(\mathcal{P}(\boldsymbol{D}) \boldsymbol{D} + \boldsymbol{D}^* \right)$$
(3.67)

Cette équation gouverne l'évolution de la conformation des polymères. Les corrélations contenues dans le terme D^* décrivent l'influence entre les agitations thermiques sur la conformation des polymères à l'échelle macroscopique. Au repos, i.e $\mathbf{u} = 0$, $\frac{d\mathbf{D}}{dt} = 0$ et $\mathcal{P} \simeq 1$ on a l'équation (3.67) qui devient $\mathbf{D} = \mathbf{D}^*$ et le vecteur bout à bout \mathbf{R} est orienté aléatoirement dans toutes les directions et donc le tenseur \mathbf{D} est isotrope soit :

$$\boldsymbol{D} = D_0 \boldsymbol{I} \tag{3.68}$$

Où I est la matrice identité, et D_0 est une constante. Comme à l'équilibre $\langle \mathbf{R}^2 \rangle = R_0^2$ (voir (3.50)) et sachant que la trace du tenseur $tr(\mathbf{D}) = \langle \mathbf{R}^2 \rangle$, alors :

$$3D_0 = R_0^2 \tag{3.69}$$

Nous obtenons l'expression du tenseur de corrélation D^{\star} :

$$\boldsymbol{D}^{\star} = \frac{R_0^2}{3} \boldsymbol{I} \tag{3.70}$$

En remplaçant l'expression de D^* dans le cas général, nous obtenons :

$$\frac{d\boldsymbol{D}}{dt} = \boldsymbol{D} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{D} - \frac{1}{\tau_p} \left(\mathcal{P}(\boldsymbol{D})\boldsymbol{D} - \frac{R_0^2}{3} \boldsymbol{I} \right)$$
(3.71)

Le modèle résultant est appelé Oldroyd B lorsque $\mathcal{P} = 1$ et FENE-P avec P pour Peterlin lorsque $\mathcal{P} > 1$. Il faut noter que le modèle FENE-2 suit les polymères avec un point de vue Lagrangien, et que le modèle FENE-P est Eulérien. Pour avoir l'équation (3.71) d'un point de vue Eulérien, comme toutes les composantes de l'équation sont des forces et sans opérateur différentiel, il suffit de remplacer la dérivation totale (Lagrangienne) en temps par une dérivation particulaire (Eulériennne), et nous obtenons la forme finale du modèle FENE-P :

$$\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{D} = \boldsymbol{D} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{D} - \frac{1}{\tau_p} \left(\mathcal{P}(\boldsymbol{D}) \boldsymbol{D} - \frac{R_0^2}{3} \boldsymbol{I} \right)$$
(3.72)

3.6.4 Adimensionnement et formulation du modèle

Pour simplifier l'écriture, la plupart des ouvrages présentent l'équation (3.72) sous forme adimensionnelle : nous faisons un changement de variable :

$$\boldsymbol{C} = \frac{3\boldsymbol{D}}{R_0^2} \tag{3.73}$$

Suite à ce changement de variable, la fonction $\mathcal{P}(\mathbf{D})$ doit être modifiée en conséquence : on doit remplacer la limite R_{max} avec une limite normalisée par $\frac{R_0}{\sqrt{3}}$:

$$\mathcal{P}(C) = \frac{1}{1 - \frac{C_{nn}}{(L_{max})^2}}$$
(3.74)

Où $L_{max} = \sqrt{3}R_{max}/R_0.$

Avec cet adimensionnement, nous reformulons le modèle FENE-P au lieu de l'équation (3.72), nous avons :

$$\frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} - \frac{1}{\tau_p} (\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
(3.75)

Comme nous avons vu dans la section 3.6.1, la contrainte créée par le polymère pour FENE-2 s'écrit :

$$\boldsymbol{S}_{p} = n(K_{G}\mathcal{P}(\boldsymbol{D})\boldsymbol{D} - k_{B}T\boldsymbol{I}) = n\left(\frac{3k_{B}T}{R_{0}^{2}}\frac{R_{0}^{2}}{3}\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C} - k_{B}T\boldsymbol{I}\right) = nk_{B}T(\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
(3.76)

Où on a remplacé K_G et R_0 par son expression (voir (3.20) et (3.51)).

En notant :

$$\nu_p = nk_B T \tau_p \tag{3.77}$$

le paramètre ν_p a la dimension d'une viscosité et est appelé viscosité du polymère, il est relié à la concentration des polymères n (nombre de polymères par unité de volume).

Si on réinjecte S_p dans l'équation (3.54), on obtient finalement :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot \left(\mathcal{P}(\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{C} \right) - \nu_f \Delta \mathbf{u}$$
(3.78)

3.6.5 Formulation générale

Dans le cadre de cette thèse, les équations (3.78) et (3.75) régissent la dynamique des fluides Non Newtonienne et elles s'écrivent de manière générale :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot \left(\mathcal{P}(\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})\boldsymbol{C} \right) - \nu_f \Delta \mathbf{u}$$
(3.79)

$$\frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} - \frac{1}{\tau_p} (\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
(3.80)

Le système est caractérisé par les nombres sans dimensions suivant :

 Le nombre de Reynolds est utilisé pour caractériser la dynamique de l'écoulement. Il est défini dans le chapitre II, nous rappelons sa formule :

$$Re = \frac{UL}{\nu_f} \tag{3.81}$$

 Un nombre adimensionnel caractérise l'étirement polymère. Dans un écoulement avec un gradient de vitesse moyenne (dans un rhéomètre par example), nous pouvons définir le nombre de Weissenberg qui est le produit du temps de relaxation par ce gradient de vitesse :

$$Wi = \Gamma \tau_p \tag{3.82}$$

Quand $Wi \gg 1$, le polymère est très étiré et inversement, quand Wi < 1, le polymère n'est pas étiré.

Dans une turbulence homogène isotrope, nous n'avons pas de gradient de vitesse moyenne, mais il existe localement un gradient de vitesse, le gradient de vitesse doit être compris au sens statistique. Par un raisonnement dimensionnel, ce gradient de vitesse est une fréquence (donc inverse d'un temps), dans ce cas, le nombre de Weissenberg devient le nombre de Deborah, qui est le ratio entre le temps de relaxation et une échelle de temps :

$$De = \frac{\tau_p}{\tau_f} \tag{3.83}$$

Dans ce contexte, nous ne distinguons pas le nombre de Weissenberg et le nombre de Deborah.

 Un nombre adimensionnel caractérise le ratio entre l'effet visqueux et l'effet du polymère. Nous pouvons le définir comme le ratio entre 2 viscosités :

$$s = \frac{\nu_p}{\nu_f} \tag{3.84}$$

Dans la littérature, il existe également un autre nombre adimensionnel qui sert à cette fin :

$$\beta = \frac{\nu_p}{\nu_f + \nu_p} = \frac{s}{s+1} \tag{3.85}$$

3.6.6 Bilan d'énergie

D'après la relation (3.24) dans le paragraphe 3.3.4, et l'adimensionnement 3.73, l'expression de l'énergie élastique pour un polymère s'écrit sous l'hypothèse de faible étirement ($\mathcal{P}(\mathbf{C}) \approx 1$) :

$$e'_{p} = \frac{1}{2} K_{G} . D_{nn} = \frac{1}{2} K_{G} \left(\frac{R_{0}^{2}}{3} C_{nn} \right)$$
(3.86)

Comme la concentration des polymères est c, dans une unité de volume contenant c polymères, l'énergie élastique totale par unité de volume est :

$$e_p = ne'_p = c \frac{R_0^2}{6} K_G \left(C_{nn} \right) = K_p C_{nn}$$
(3.87)

$$K_p = \frac{cK_G}{6}R_0^2$$
 (3.88)

L'équation qui décrit l'évolution de l'énergie élastique des polymères est obtenue en prenant la trace de chaque terme dans l'équation (3.80), en prenant en compte l'expression de l'énergie élastique sous l'hypothèse de faible étirement $e_p = K_p tr(\mathbf{C}) = K_p C_{ii}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}e_p + \mathbf{u} \cdot \nabla e_p = 2K_p(C_{ij}\partial_j u_i) - \frac{1}{\tau_p}(e_p - 3K_p)$$
(3.89)

L'équation qui décrit l'évolution de l'énergie cinétique de l'écoulement porteur, est obtenue en faisant le produit scalaire de chaque terme de l'équation (3.79) par \mathbf{u} , en prenant en compte l'expression de l'énergie cinétique $e_k = \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}e_k + \mathbf{u} \cdot \nabla e_k = -\mathbf{u} \cdot \nabla p + \left(\frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot (\mathcal{P}(\mathbf{C})\mathbf{C} - \mathbf{I})\right) \cdot \mathbf{u} - (\nu_f \Delta \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} \qquad (3.90)$$

D'un point de vue énergétique, les deux termes de couplage des équations (3.90) et (3.89) doivent se compenser, afin d'assurer une conservation d'énergie. Effectivement, en faisant un bilan global :

• le terme de couplage $e_{f \to p} = 2K_p C_{ij} \partial_j u_i$ s'écrit dans l'équation de l'énergie élastique (3.89) :

$$\iiint_{V} e_{f \to p} d^{3}(\boldsymbol{x}) = 2.K_{p} \iiint_{V} C_{ij} \partial_{j} u_{i} d^{3}(\boldsymbol{x})$$
(3.91)

• le terme de couplage s'écrit dans l'équation de l'énergie cinétique (3.90), sous l'hypothèse de faible étirement ($\mathcal{P}(\mathbf{C}) \approx 1$) :

$$e_{p \to f} = \frac{\nu_p}{\tau_p} \left(\partial_j (C_{ij} - \delta_{ij}) \right) u_i = \frac{\nu_p}{\tau_p} \left(\partial_j C_{ij} \right) u_i = \frac{\nu_p}{\tau_p} \left(\partial_j (C_{ij} u_i) - C_{ij} \partial_j u_i \right).$$
(3.92)

Quand nous calculons le bilan d'énergie sur tout le volume, la divergence d'une quantité quelconque est nulle, nous avons le bilan d'énergie du premier terme de couplage qui s'écrit :

$$\iiint_{V} e_{p \to f} d\boldsymbol{x}^{3} = \frac{\nu_{p}}{\tau_{p}} \left(\iiint_{V} \partial_{j} (C_{ij} u_{i}) d\boldsymbol{x}^{3} - \iiint_{V} C_{ij} \partial_{j} u_{i} d\boldsymbol{x}^{3} \right)$$
(3.93)

$$= -\frac{\nu_p}{\tau_p} \iiint_V C_{ij} \partial_j u_i d\boldsymbol{x}^3 \tag{3.94}$$

Nous avons la conservation d'énergie qui s'écrit :

$$\iiint_{V} e_{f \to p} d\boldsymbol{x}^{3} + \iiint_{V} e_{p \to f} d\boldsymbol{x}^{3} = 0$$
(3.95)

car on vérifie que $2K_p = \frac{\nu_p}{\tau_p}$, en effet d'après (3.20) et (3.77) :

$$2K_p = \frac{cK_G}{3}R_0^2 = \frac{c}{3}\frac{3Tk_B}{R_0^2}R_0^2 = ck_BT$$
(3.96)

$$\frac{\nu_p}{\tau_p} = \frac{ck_B T \tau_p}{\tau_p} = ck_B T \tag{3.97}$$

3.6.7 Signification physique des paramètres

Le dynamique de notre système est décrite par les équations (3.79) et (3.80). Dans ces équations, nous avons 4 paramètres :

- ν_f est la viscosité du solvant.
- ν_p est un degré de liberté de système, sa signification physique sera discutée par la suite.
- $-\tau_p$ est le temps de relaxation du polymère.
- $-L_{max}$ est l'extension maximale (normalisée) du polymère.

Dans cette section nous nous intéressons aux 2 paramètres du modèle ν_f et ν_p . On a ν_f qui est la viscosité du solvant, elle est facilement quantifiable. Sa valeur typique dans la température ambiante dans le cas de l'eau est $\nu_{eau} = 1,007.10^{-6} [m^2 s^{-1}]$, du glycérol $\nu_{alycerol} = 1182.10^{-6} [m^2 s^{-1}]$, de l'éthanol $\nu_{ethanol} = 1.51.10^{-6} [m^2 s^{-1}]$,...

Par contre, comment quantifie t-on le paramètre ν_p ? Afin de mieux comprendre le rôle de la viscosité dans le modèle, nous pouvons appliquer le modèle dans les configurations simples et trouver une solution analytique. L'écoulement Couette-Plan est un excellent exemple car il peut être utilisé pour modéliser un rhéomètre. La figure 3.13 représente schématiquement l'écoulement de Couette : l'écoulement est confiné entre 2 plans parallèles distants de H, et s'étend à l'infini dans les directions $\mathbf{e}_{\boldsymbol{x}}$ et $\mathbf{e}_{\boldsymbol{z}}$. L'écoulement est suivant la direction $\mathbf{e}_{\boldsymbol{x}}$ avec la vitesse V_0

Considérons la configuration suivante : un écoulement établi (régime stationnaire, toutes les dérivations temporelles sont nulles), avec 2 parois parallèles infiniment larges dans les 2 directions x et z, la distance entre ces 2 parois est h. Le fluide porteur subi une force volumique constante $\boldsymbol{f}_v = f_v \cdot \boldsymbol{x}$



FIGURE 3.13: Schéma illustrant l'écoulement de Couette plan

La géométrie impose une indépendance suivant x et z de toutes les grandeurs, et la vitesse de l'écoulement suivant les directions \mathbf{e}_{y} et \mathbf{e}_{z} est nulle :

$$\mathbf{u} = u_x(y)\mathbf{e}_{\boldsymbol{\mathcal{X}}} \tag{3.98}$$

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(\boldsymbol{y}) \tag{3.99}$$

Nous négligeons la gravité et toutes les autres forces volumiques. Les champs C et **u** suivent toujours l'équation gouvernant (3.79) et (3.80). Afin de simplifier l'écriture, nous omettons la dépendance en C de la fonction de Peterlin, elle s'écrit donc \mathcal{P} au lieu de $\mathcal{P}(C)$. Nous rappelons ici ces équations :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot (\mathcal{P} \boldsymbol{C} - \boldsymbol{I}) - \nu_f \Delta \mathbf{u}$$
(3.100)

$$\frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} - \frac{1}{\tau_p} (\mathcal{P}\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
(3.101)

Ce système d'équations admet une solution non triviale qui est la suivante :

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \Gamma y \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.102}$$

$$\boldsymbol{C} = \frac{1}{\mathcal{P}} \begin{pmatrix} \left(1 + 2\left(\frac{\tau_p\Gamma}{\mathcal{P}}\right)^2\right) & \left(\frac{\tau_p\Gamma}{\mathcal{P}}\right) & 0\\ \left(\frac{\tau_p\Gamma}{\mathcal{P}}\right) & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(3.103)

avec cisaillement de vitesse qui vaut $\Gamma = \frac{V_0}{H}.$ La contrainte visque use s'écrit :

$$\boldsymbol{S}_{f} = \nu_{f} \begin{pmatrix} 0 & \Gamma & 0\\ \Gamma & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + p\boldsymbol{I}$$
(3.104)

La contrainte créée par les polymères s'écrit :

$$\boldsymbol{S}_{p} = \frac{\nu_{p}}{\tau_{p}}\boldsymbol{C} = \frac{\nu_{p}}{\mathcal{P}} \begin{pmatrix} 0 & \Gamma & 0\\ \Gamma & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\nu_{p}}{\mathcal{P}} \begin{pmatrix} 2\left(\frac{\tau_{p}\Gamma^{2}}{\mathcal{P}^{2}}\right) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\nu_{p}}{\mathcal{P}\tau_{p}}\boldsymbol{I} \qquad (3.105)$$

La contrainte totale sur le fluide s'écrit :

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_{f} + \boldsymbol{S}_{p} = \begin{pmatrix} \nu_{p} \\ \overline{\mathcal{P}} + \nu_{f} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Gamma & 0 \\ \Gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\nu_{p}}{\overline{\mathcal{P}}} \begin{pmatrix} 2\begin{pmatrix} \frac{\tau_{p}\Gamma^{2}}{\overline{\mathcal{P}}^{2}} \end{pmatrix} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\nu_{p}}{\overline{\mathcal{P}}\tau_{p}} + p \end{pmatrix} \boldsymbol{I}$$
(3.106)

Certaines composantes de ce tenseur des contraintes peuvent être mesurées à l'échelle macroscopique grâce au rhéomètre. Nous pouvons mesurer les 3 grandeurs suivantes :

— La contrainte de cisaillement $S_{12} = \Gamma(\frac{\nu_p}{\mathcal{P}} + \nu_f)$. Cette contrainte se manifeste macroscopiquement comme une force de traînée sur une unité de surface : $S_{12} = F_x/S$ Nous en déduisons une viscosité apparente par :

$$\nu' = \frac{S_{12}}{\Gamma} = \frac{\nu_p}{\mathcal{P}} + \nu_f \tag{3.107}$$

— La première contrainte normale

$$S_{11} - S_{22} = \frac{2\nu_p \tau_p \Gamma^2}{\mathcal{P}^3} \tag{3.108}$$

Cette contrainte se manifeste macroscopiquement comme une force normale sur une unité de surface qui tend à écarter les 2 plaques : $S_{11} - S_{22} = F_z/S$ — La seconde contrainte normale $S_{22} - S_{33} = 0$

Nous constatons qu'il existe 2 comportements asymptotiques pour la viscosité apparente :

- Avec un faible cisaillement $\Gamma \ll 1$, les polymères ne sont pas fortement étirés : $\mathcal{P} \approx 1$, la viscosité apparente ν' tend vers $\nu_p + \nu_f$.
- Avec un très grand cisaillement $\Gamma \gg 1$, les polymères sont fortement étirés : $\mathcal{P} \gg 1$, la viscosité apparente ν' tend vers ν_f ce qui est égal à la viscosité du solvant.

Ces 2 comportements asymptotiques du modèle FENE-P peuvent être assimilés au comportement d'un fluide "rhéofluidifiant" : un fluide rhéofluidifiant est créé par le mélange d'une quantité de polymère dans un solvant Newtonien et sa courbe de viscosité en fonction du taux de cisaillement admet 2 plateaux : une viscosité maximale ν_{max} quand le taux de cisaillement tend vers zéro, et la viscosité du solvant ν quand le taux de cisaillement tend vers l'infini.

La comparaison de la solution analytique du modèle FENE-P avec le comportement des fluides rhéofluidifiants permet de donner une signification physique au paramètre ν_p : $\nu_p = \nu_{\infty} - \nu_0$ où ν_{∞} est la valeur asymptotique de la viscosité quand le cisaillement tend vers l'infini, et ν_0 est la valeur de la viscosité quand le cisaillement tend vers zéro. Donc nous pouvons mesurer le paramètre ν_p . Nous observons également l'effet Weissenberg avec le modèle FENE-P : une contrainte normale non nulle dans la direction normale à la direction de cisaillement. En mesurant cette contrainte, nous pouvons déduire le temps de relaxation τ_p à l'aide de la relation (3.108).

3.7 Interaction polymères-turbulence

Comme nous avons vu dans la partie 3.6.5, l'extension des polymères est caractérisée par le nombre de Weissenberg (ou Déborah), ce qui est le ratio entre le temps de relaxation du polymère et un temps caractéristique du fluide. Pour un écoulement turbulent, le temps caractéristique est dépendant fortement de l'échelle à laquelle on regarde : le temps caractéristique des plus petites échelles sont plus courtes que celles des grandes échelles. On défini donc une échelle de Lumley[43], qui marque l'échelle où le temps de turbulence est égal au temps de relaxation des polymères : les échelles plus grandes que l'échelle de Lumley n'affecte pas l'extension des polymères. L'échelle de Lumley noté l_L , associé à son temps de turbulence (temps d'Obukov [41]) $\tau_{l_L} = \sqrt{k^3 E_k}^{-1}$, est donc définie par :

$$Wi_{l_L} = 1 = \frac{\tau_p}{\tau_{l_L}}$$
 (3.109)

donc il faut chercher k_L tel que $\sqrt{k_L^3 \cdot E_k(k_L)}^{-1} = \tau_p$ et ensuite $l_L = 1/k_L$.

De Gennes [72] ajoute à cette image un argument énergétique : nous avons un système couplé et l'énergie est distribuée entre l'énergie cinétique de turbulence et l'énergie élastique des polymères. Quand l'énergie cinétique domine par rapport à l'énergie élastique, l'effet de couplage va transférer une partie de l'énergie cinétique vers l'énergie élastique, et inversement. L'énergie de turbulence est localisée principalement aux grandes échelles, donc à ces échelles, l'énergie cinétique turbulent domine par rapport à l'énergie élastique. La théorie de De Gennes prédit que l'énergie cinétique turbulente décroit en échelle plus rapidement que l'énergie élastique des polymères, et il existe une échelle, que on l'appelle l'échelle de De Genne, qui est le croisement entre ces 2 énergies : pour les échelles plus petites que l'énergie cinétique, et le flux d'énergie vient des polymères vers le fluide. Cette échelle noté l_{DG} est définie à la fin du paragraphe 6.3.2.

Xi et al. [90] propose une modification par rapport à l'image de De Gennes, en considérant la comparaison entre le flux d'énergie au lieu de l'équilibre d'énergie, qui conduit à une échelle de coupure différente. Comme le flux d'énergie croit avec l'énergie, cette nouvelle échelle de coupure n'est pas très loin de l'échelle de De Gennes.

Dans l'équation dynamique des polymères que nous considérons, nous ne trouvons pas un terme qui limite le développement d'énergie élastique du polymère aux petites échelles, donc l'énergie des polymères peut, a priori, se développer à des échelles infiniment petites. Évidemment, nous devons arrêter à la limite de validité de notre modèle qui est basé sur les hypothèses de la mécanique des milieux continu (macroscopique).

3.8 Conclusion

Dans cette partie nous avons détaillé notre modèle macroscopique FENE-P et Oldroyd-B que nous allons utiliser dans la suite pour simuler des écoulements turbulents en présence de polymères. Ces modèles FENE-P et Oldroyd-B décrivent les polymères du point de vue Eulérien et macroscopique. L'avantage de ces modèles est de négliger les interactions entre les échelles des fluides et les échelles atomiques des polymères. Ils permettent de simuler une gamme plus importante d'échelles fluides. Nous allons choisir cette approche au lieu de l'approche microscopique car nous nous intéressons plutôt à l'interaction entre polymères et turbulence qu'au comportement rhéologique des polymères.

Chapitre

Méthode numérique

Sommaire

4.1	Intro	oduction	
4.2	Cho	ix de méthode 80	
4.3	Mét	hode pseudo-spectrale 81	
	4.3.1	La discrétisation	
	4.3.2	Transformation de Fourier Discrète (DTF)	
	4.3.3	Aliasing dans une produit de convolution	
	4.3.4	Oscillations de Gibbs	
	4.3.5	Application à un modèle 3D	
	4.3.6	Parallélisation	
	4.3.7	Équation de Navier-Stokes	
4.4	Équa	ation dynamique du polymère	
	4.4.1	Formulation classique	
	4.4.2	Formulation par décomposition en racine carré (square	
		root formulation [3])	
4.5	Avar	ncement en temps	
	4.5.1	Schéma implicite et schéma explicite	
	4.5.2	Schéma avec une étape	
	4.5.3	Schéma multi-étape : Adams-Bashforth	
	4.5.4	Stabilité numérique des schémas	
4.6	Initi	alisation	
	4.6.1	Initialisation du champs de vitesse fluide	
	4.6.2	Initialisation du champs de conformation	
4.7	Valio	lation	
	4.7.1	Écoulement de Kolmogorov	
	4.7.2	Écoulement cellulaire	
4.8	Con	clusion	

4.1 Introduction

La modélisation numérique consiste à décrire les grandeurs physiques d'un système par des objets mathématiques avec une quantité d'information finie. Une simulation numérique est la résolution à l'aide d'un programme informatique de l'évolution d'un modèle numérique, à partir d'un état initial donné. La simulation numérique est fonction du temps. L'évolution doit obéir à des lois physiques, traduites par des équations, et implémentés dans ce programme. Une simulation numérique directe (DNS) est une simulation qui n'utilise aucun hypothèse de simplification de ces équations.

Dans le cadre de la mécanique des fluides, les équations qui gouvernent la dynamique sont les équations de Navier-Stokes. La nature d'une DNS exige que la résolution soit suffisamment petite : plus petite que la plus petite structure fluide pour pouvoir décrire tout les phénomènes possibles dans l'écoulement. Une DNS demande donc souvent une très haute résolution. Cela est très cher en terme de ressource de calculs.

4.2 Choix de méthode

Il y a différentes moyens de modéliser un système, et cela conduit à différentes méthodes pour résoudre les équations.

Nous pouvons regarder les grandeurs physiques du point de vue microscopique (Lagrangien), du point de vie macroscopique (Eulérien) ou du point de vue probabilistique (Fokker-Plank).

Nous choisissons ici de modéliser la dynamique de la turbulence et la dynamique des polymères par la description macroscopique et Eulérienne, où toutes les grandeurs physiques sont des fonctions continues de la position dans l'espace et aussi dans le temps.

Il existe différentes méthodes pour la résolution dans l'espace physique comme : élément fini, volume fini ou différences fini.

Le point commun entre ces méthodes est la modélisation qui consiste à discrétiser le champs physique au départ. L'opération de discrétisation est de diviser l'espace physique en des sous-domaines, délimités par des mailles et des noeuds, et en l'évaluation de la valeur du champ sur chaque noeud. L'avantage de ce type de méthode est la possibilité de résoudre les systèmes avec des géométries très complexes, mais l'inconvénient est la précision des calculs de dérivation.

A côté de ces méthodes de discrétisation, il existe des méthodes spectrales, dont l'idée principale est d'approximer le champs physique par une combinaison linéaire d'un série de fonctions prédéfinies. Cette série de fonctions doit former une base de fonction orthonormées. On construit un espace spectral avec cette base. Nous choisissons ici la transformation la plus couramment utilisée : la transformation Fourier discrète (DFT), qui est basée sur les fonctions sinusoïdes complexes. L'espace spectral dans notre cas est l'espace de Fourier. L'avantage de cette méthode est :

 Pour un domaine homogène et isotrope, les méthodes spectrales sont bien supérieures aux méthodes de discrétisation dans l'espace spatial en terme de précisions à résolution équivalente.

- Sa popularité au sein de la communauté scientifique qui a développé beaucoup d'outils, d'algorithmes, et surtout d'expériences numériques pour validations.
- L'expression de la dérivation y est très simple, et exacte donc peu coûteuse en terme de calcul et enfin facile à implémenter.

Mais il y a aussi des inconvénients :

- Les opérations multiplications dans l'espace physique deviennent un produit de convolution dans l'espace spectral, c'est donc cher en terme de calcul.
- Ces méthodes ne supportent pas les géométries complexes.
- Il y a des difficultés numériques propres à ce type de méthodes.

Pour minimiser le problème de multiplications, nous utilisons une méthode dite "pseudo spectrale", pour laquelle toutes les opérations de multiplication sont calculées dans l'espace physique, et nous revenons dans l'espace de Fourier pour effectuer les autres opérations. Cette méthode peut fournir des résultats statistiques à la fois liés à l'espace physique et à l'espace spectral.

4.3 Méthode pseudo-spectrale

Nous avons choisi d'implémenter la méthode pseudo-spectrale. Cette partie va donc présenter les points clés de cette méthode. La méthode pseudo spectrale fut développé par Orszag et Patterson[53] en 1972 (simulation 2D) et par Rogallo[63] en 1977 (simulation 3D). Cette méthode permet de travailler ainsi à la fois dans l'espace physique, et à la fois dans l'espace de Fourier pour combiner l'avantage des deux espaces :

- Pour calculer le produit, nous nous plaçons dans l'espace physique, où la multiplication est triviale.
- Pour calculer la dérivation, nous nous plaçons dans l'espace de Fourier, où la dérivation est triviale.

Pour ce faire, il faut que nous enregistrions l'information du champs dans les 2 espaces : Physique et Fourier.

4.3.1 La discrétisation

Une fonction continue dont la forme analytique est inconnue a besoin d'une quantité infinie d'information pour être décrite et stockée (même si le domaine étudié est fini). Il n'est donc pas possible de la construire dans un programme informatique. Il est nécessaire de l'approximer par des objets avec une quantité d'information finie. Une solution très souvent employée est la discrétisation.

Le concept de la discrétisation est naturel et intuitif : nous divisons l'espace (ou le temps) en de petits sous-domaines, délimités par les noeuds, et nous effectuons les mesures aux noeuds. Une discrétisation régulière est appelée un échantillonnage, et les positions relevées sont appelés échantillons.

Considérons un cas 1D, le domaine réel [0, l] échantillonné en N points, et une fonction f sur ce domaine et null ailleurs. Le nombre N est aussi appelé la résolution. Les positions des échantillons forment une suite de N éléments. La suite des échantillons s'écrit¹

$$x_n = \frac{nl}{N} \tag{4.1}$$

Où n = 0, 1, 2.., (N - 1)

Les valeurs de la fonction discrétisée forment aussi une suite de taille N que nous appelons la suite discrétisée de la fonction f:

$$f_n = f(x_n) = f\left(\frac{nl}{N}\right) \tag{4.2}$$

L'unité de distance devient la distance entre 2 échantillons successifs : $r = \frac{l}{N}$ L'inverse de la résolution s'appelle la fréquence d'échantillonnage.

La suite (f_n) maintenant peut être stockée dans la mémoire, mais elle n'est pas une fonction, nous ne pouvons pas appliquer les opérations mathématiques nécessaires. Pour ce faire, nous avons besoin de reconstruire ou d'approximer la fonction originale à partir des informations stockées. La discrétisation est une dégradation de l'information. Nous devons choisir un compromis entre la précision souhaitée obtenue et la quantité d'information qu'il faut manipuler.

Suivant différentes méthodes, il y a des différentes moyens pour effectuer ce travail. Dans le cadre de ce mémoire, nous allons seulement aborder la méthode de Fourier. Les propriétés principales de la transformé de Fourier ont été explicitées précédemment dans le chapitre II. Ici nous nous intéressons à la discrétisation de la transformée de Fourier : la DFT (transformé de Fourier discrète).

Le passage entre la fonction continue et sa version discrétisée peut être formulé en utilisant la fonction de Dirac (en 3D), qui est définie précédemmente dans le chapitre II (Comme les propriétés de cette fonction sont valides à toutes les dimensions finies, ici, nous rappellons les opérations de bases pour le cas 1D).

A partir de la fonction de Dirac, nous pouvons construire une fonction "peigne de Dirac" avec des espacements de r comme une somme de fonctions de Dirac :

$$III_r(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta_{nr}(x) \tag{4.3}$$

La fonction de Dirac et le peigne de Dirac ont les propriétés suivantes :

$$-\lim_{\epsilon \to 0} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \delta_{x_0}(x) dx = 1$$
$$-\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{x_0}(x) dx = 1$$
$$-f(x) * \delta_{x_0}(x) = f(x-x_0)$$

^{1.} Traditionnellement, le n-ème élément dans une suite est noté avec un indice, mais si nous avons besoin d'exprimer les vecteurs et matrices, il peut y avoir une confusion dans la notation : l'indice i dans la notation u_i est la i-ème composant du vecteur **u**, dans ce cas, l'indice de la suite sera noté à l'extérieur : n-ième élément de la suite de i-ème composant du vecteur **u** s'écrit $(u_i)_n$. Nous avons besoins également de distinguer les suites dans l'espace physique et les suites dans l'espace physique par les indices et les positions dans une suite dans l'espace physique par les indices et les positions dans une suites dans l'espace spectrale par des exposant.

$$- f(x) * III_r(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} f(x+k.r)$$
$$- TF(III_r(x)) = III_{2\pi/r}(k)$$

Avec (*) qui désigne le produit de convolution.

La fonction discrète f_d peut être calculée directement à partir de la fonction original f multiplié avec la peigne de Dirac :

$$f_d(x) = f(x).III_r(x) \tag{4.4}$$

La suite discrète peut être calculé à partir de la fonction discrète :

$$f_n = \int_{x_n - r/2}^{x_n + r/2} f_d(x) dx = \int_{x_n - r/2}^{x_n + r/2} f(x) \delta_{x_n}(x) dx = f(x_n)$$
(4.5)

Donc, intégrale sur la domaine [0,
l[de la fonction discrète est lié avec la somme de la suit
e f_n

$$\int_{0}^{l} f(x)dx = \lim_{N \to \infty} \frac{l}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f_n = \lim_{N \to \infty} \frac{l}{N} \int_{0}^{l} f_d(x)dx$$
(4.6)

La transformée de Fourier de la fonction f_d donne :

$$\widehat{f}_d = TF(f_d) = TF(fIII_r) = TF(f) * TF(III_r) = \widehat{f} * III_{2\pi/r}$$
(4.7)

Où (*) est la produit de convolution. Un produit de convolution d'une fonction avec la fonction $III_{\frac{2\pi}{r}}$ est une périodisation de cette fonction avec période $\frac{2\pi}{r}$:

$$\widehat{f}_d = \widehat{f} * III_{2\pi/r} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(k') \delta_{2n\pi/r}(k-k') dk' = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{f}\left(k + \frac{2n\pi}{r}\right) \quad (4.8)$$

Cela re-démontre une propriété très importante de la transformé de Fourier : une discrétisation dans l'espace physique correspond à une périodisation dans l'espace spectral. Nous avons déjà démontré que la discrétisation dans l'espace spectrale correspond à une périodisation dans l'espace physique dans le chapitre II. Comme nous travaillons numériquement sur les 2 espaces : espace physique et espace de Fourier, nous devons :

- Discrétisation dans l'espace de Fourier (on remplace la transformé de Fourier par la série de Fourier) : les fonctions dans l'espace physiques doit être tronqué (garder les valeurs d'une fonction dans une intervalle fini et mettre à zéro cette fonction en dehors de cette intervalle) et périodiser (faire le produit de convolution de cette fonction avec une fonction peigne de Dirac).
- Discrétisation dans l'espace de physique (on remplace la série de Fourier par la Transformé de Fourier Discrète (DFT)) aussi impose une périodisation dans l'espace de Fourier (qui est appelé l'aliasing). Mais les modes dans l'espace de Fourier n'est pas homogène (contrairement dans l'espace physiques), il faut prendre plus de précautions. Nous allons discuter de DFT et des techniques anti-aliasing dans les paragraphes suivant.

4.3.2 Transformation de Fourier Discrète (DTF)

Comme nous travaillons avec une boîte périodique (voir chapitre II), sans perte de la généralité, nous pouvons prendre la taille de la boîte $l = 2\pi$ afin de simplifier les expressions. Soit f(x) est une fonction périodique de période l, et soit $(f)_n$ la suite obtenue par la discrétisation en N points de la fonction f(x).

Comme la fonction f est périodique, elle peut être reconstruite de manière exacte à partir d'une série de Fourier :

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{f}\right)^k e^{ikx}$$
(4.9)

Rappelons que les coefficients de la série de Fourier sont calculés par :

$$(\widehat{f})^k = \int_{k=0}^{2\pi} f(x)e^{-\underline{i}kx}dx$$
(4.10)

La série de Fourier est à priori infinie, donc ce n'est pas possible de la traiter numériquement. Il faut garder qu'une partie fini de l'information, la partie conservée est appelée la transformée de Fourier discrète (DFT). La fonction reconstruite à partir de la DFT est notée f_K où 2K + 1 est le nombre de modes conservés :

$$f_K(x) = \sum_{k=-K}^{+K} (DFT(f))^k e^{ikx}$$
(4.11)

La différence entre la fonction originale et la fonction reconstruit par la DFT est appelée le résidu :

Les coefficients de la DFT doivent être calculés pour que le résidu soit minimisé suivant certains critères. Il y a deux techniques de calcul la DFT basées sur 2 différentes critères, on a la méthode de Galerkin et la méthode de points de collocations. On note respectivement $f_C K$ et $f_G K$ les fonctions approximées par la méthode de points de collocation et la méthode de Galerkin.

4.3.2.1 Méthode de Galerkin

On note DFT_G est la DFT calculée par la méthode de Galerkin. Si la quantité à transformer n'est pas encombrant (par la raison de clarté), la DFT_G est noté avec un chapeau avec un exposant $G : DFT_G(f)^k = (\widehat{f}^G)^k$

$$R(x) = f(x) - f_K(x)$$
(4.12)

Dans la méthode de Galerkin, le résidu est minimisé au sens des intégrale :

$$\int_{0}^{l} R(x) \cdot \varphi_k(x) dx = 0 \tag{4.13}$$

où $\varphi_k(x)$ est une fonction test, qui est prise comme : $\varphi_k(x) = \underline{i}e^{\frac{-2\pi kx}{l}} = e^{-\underline{i}kx}$. Nous avons besoin de N fonctions tests pour déterminer N modes de la DFT. Rappelons que les fonctions $\varphi_k(x)$ sont orthogonales entre elles :

$$\int_{0}^{2\pi} e^{ikx} e^{-ihx} dx = \begin{cases} 2\pi \ si \ k = h \\ 0 \ si \ k \neq h \end{cases}$$
(4.14)

En appliquant l'équation (4.14) à l'équation (4.13), nous avons pour un mode k donné :

$$\int_{0}^{2\pi} R(x) \cdot \varphi_{k}(x) dx$$

$$= \int_{0}^{2\pi} \left(\sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{f} \right)^{h} e^{\underline{i}hx} - \sum_{m=-K}^{+K} \left(\widehat{f}^{G} \right)^{m} e^{\underline{i}mx} \right) e^{-\underline{i}kx} dx$$

$$= \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{f} \right)^{h} \int_{0}^{2\pi} e^{\underline{i}hx} e^{-\underline{i}kx} dx - \sum_{m=-K}^{+K} \left(\widehat{f}^{G} \right)^{m} \int_{0}^{2\pi} e^{\underline{i}mx} e^{-\underline{i}kx} dx$$

$$= \left(\widehat{f} \right)^{k} - \left(\widehat{f}^{G} \right)^{k} = 0$$
(4.15)

Nous constatons à partir de l'équation (4.15) que la valeur d'un mode de la série de Fourier est identique au mode correspondant de la DFT calculée par la méthode de Galerkin. La DFT obtenue par la méthode de Galerkin est aussi appelée la série de Fourier tronquée.

4.3.2.2Méthode des points de collocation

La méthode de Galerkin est basée sur un calcul intégral, donc nécessite la connaissance de la forme analytique de la fonction originale, ce qui n'est pas possible dans la plupart des cas, par exemple dans les simulations numériques car les fonctions à simuler sont discrétisées. Par contre, la méthode des points de collocations est très adaptée dans ces cas. Elle consiste à forcer le résidu à la valeur nulle au certain nombre de points donnés. Le domaine [0, l] est déjà discrétisé en N points : $x_n = \frac{nl}{N}$ avec n est un entier inférieur à N. Pour déterminer les modes de la DFT, nous avons à disposition N équations

de type :

$$R(x_n) = R\left(\frac{nl}{N}\right) = 0 \tag{4.16}$$

Les modes de la DFT calculés par la méthode des points de collocation sont notés par la DFT_C . Si la quantité à transformer n'est pas encombrant (par la raison de clarté), la DFT_C est noté avec un chapeau avec un exposant C : $DFT_C(f)^k =$ $(\widehat{f}^C)^k$.

Les modes de la DFT_C sont déterminés par la formule :

$$\left(\widehat{f}^{C}\right)^{k} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f\left(x_{n}\right) e^{-\underline{i}x_{n}k} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f_{n} e^{-\underline{i}x_{n}k}$$
(4.17)

Nous pouvons constater que la DFT_C définie dans l'équation (4.17) est périodique de période N, donc nous avons un motif qui contient N modes. Or, d'après l'équation (4.11), nous avons besoin de 2K+1 modes de la DFT_C . Comme la périodisation est un artefact, les 2K+1 modes pris dans équation (4.10) ne peuvent pas être répétés. Un motif doit contenir N = 2K + 1 modes (N est forcé égale à un nombre impair).

4.3.2.3 Relation entre méthode de collocation et les séries de fourier : l'aliasing

Pour comparer les coefficients de la FFT avec les coefficients de la série de Fourier, nous injectons l'expression (4.9) dans l'équation (4.17) :

$$\left(\widehat{f}^{C}\right)^{k} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \left(\sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{f}\right)^{h} e^{ix_{n}h}\right) e^{-ix_{n}k}$$
(4.18)

Comme la série de Fourier converge absolument, l'équation (4.18) deviens :

$$\left(\widehat{f}^{C}\right)^{k} = \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{f}\right)^{h} \left(\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{\underline{i}x_{n}(h-k)}\right)$$
(4.19)

Nous pouvons démontrer facilement que la somme $\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{ix_n(h-k)}$ prend la valeur 1 quand k = h+mN et zéro quand $k \neq h+mN$ avec m est un entier quelconque. Nous obtenons finalement la relation entre les coefficients de la DFT_C et les coefficients de la série de Fourier :

$$\left(\widehat{f}^{C}\right)^{k} = \left(\widehat{f}\right)^{k} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\left(\widehat{f}\right)^{(k+mN)} + \left(\widehat{f}\right)^{(k-mN)}\right)$$
(4.20)

On retrouve la forme de l'équation (4.8). Ce résultat peut être compris comme le DFT_C est une périodisation de la série de Fourier. Cela peut expliqué par : la DFT_C contient une opération supplémentaire de discrétisation dans l'espace physique par rapport à la série de Fourier, donc dans l'espace de Fourier, la DFT_C est entachée par les repliements des modes supérieurs à K. La différence entre les coefficients de la DFT_C et ceux de la série de Fourier est un erreur de type "aliasing" :

$$E_A = \sum_{m=1}^{\infty} \left((\hat{f})^{(k+mN)} + (\hat{f})^{(k-mN)} \right)$$
(4.21)

Ce problème d'aliasing ne peut pas être éliminé, mais comme la DFT_C converge vers la série de Fourier quand N tend vers infini, l'erreur d'aliasing est nécessairement bornée. Il est démontré (Canuto et al., 1988)[16] que :

$$||E_A||_{L^2(0,2\pi)} < Constant \ K^{-m}||f^m||_{L^2(0,2\pi)}$$
(4.22)

où $||.||_{L^2(0,2\pi)}$ est une norme L^2 définie sur le domaine $[0,2\pi]$. Donc la seule solution est d'augmenter la résolution N jusqu'à ce que l'erreur d'aliasing E_A soit négligeable. Par la suite nous allons supposer que N est assez grand pour que E_A soit suffisamment petit : $(\hat{f}^C)^k \approx (\hat{f})^k$

Une conséquence est que : si on note K_{max} est le nombre d'onde non nul le plus grand de la série $(\widehat{f})^k$ (Dans le cas où la série de Fourier est infinie, $K_{max} = \infty$) :

$$\left(\widehat{f}\right)^{k} = 0 \text{ pour } \forall k > K_{max} \text{ et } \left(\widehat{f}\right)^{K_{max}} \neq 0$$
 (4.23)

alors, l'approximation par les méthodes de Galerkin et des points de collocation est exacte si $K_{max} < \frac{N}{2}$

Pratiquement nous utilisons un algorithme pour accélérer le calcul de la DFT_C , qui est appelé FFT (Fast Fourrier Transform). Il y a plusieurs algorithmes de FFT qui ont été développés par : Cooley et Tukey 1965, Good-Thomas 1958/1963, G. Bruun 1978 [58] ... Dans ce travail, nous utilisons la bibliothèque JMFFT développée à IDRIS.

Le résidu dans la méthode de Galerkin est laissé libre en tous points différentes des points de collocation, et cette différence peut être importante si la contribution des modes tronqués (supérieurs à K) est importante. Cette situation a lieu typiquement quand nous essayons d'approximer une fonction discontinue, le résidu dans ce cas ne peut pas être complètement enlevé, et il est appelé l'oscillation de Gibbs.

4.3.3 Aliasing dans une produit de convolution

L'"Aliasing" est, comme nous l'avons vu dans la section précédente (cf. 4.3.2.2), le problème lié à la périodisation des fonctions dans l'espace de Fourier. Le première type d'erreur d'aliasing est liée à l'approximation de la série de Fourier par la DFT_C (cf. 4.3.2). Dans cette section, nous allons étudier un autre type d'erreur d'aliasing qui viens de produit de convolution dans l'espace de Fourier.

Soit 2 fonctions a(x) et b(x) périodiques de période 2π . Supposons que le premier type d'erreur d'aliasing soit nulle, c'est à dire : les coefficients non nuls le plus grands (K_{max}) des séries de Fourier \hat{a} et \hat{b} soient fini. (Sans perte de la généralité, nous supposons que les coefficients non nuls le plus grands de ces 2 séries soient égaux : $K_{max}[\hat{a}] = K_{max}[\hat{b}] = K_{max}$)

Avec cette condition, si nous discrétisons l'espace physique en N points, tel que : $N > 2K_{max}$, l'erreur de l'aliasing décrit dans la section 4.3.2 est nulle, l'approximation de la série de Fourier par la DFT_C est exacte.

Considérons le produit c(x) = a(x)b(x) :

$$a(x)b(x) = \left(\sum_{p=-\infty}^{\infty} (\widehat{a})^p e^{ipx}\right) \left(\sum_{q=-\infty}^{\infty} (\widehat{b})^q e^{iqx}\right)$$
$$= \left(\sum_{p=-K_{max}}^{K_{max}} (\widehat{a})^p e^{ipx}\right) \left(\sum_{q=-K_{max}}^{K_{max}} (\widehat{b})^q e^{iqx}\right)$$
$$= \sum_{k=-2K_{max}}^{2K_{max}} \sum_{p=-K_{max}}^{K_{max}} (\widehat{a})^p (\widehat{b})^{k-p} e^{ikx}$$
(4.24)

Les coefficients non nuls de la série de Fourier de la fonction produit c(x) étend entre $-2K_{max}$ et $2K_{max}$. Donc une discrétisation avec la résolution $N = 2K_{max} + 1$ de produit a(x)b(x) fait émerger une erreur d'aliasing dans l'espace de Fourier. Ce type d'erreur peut être accumulé dans les simulations et fausser le résultat, il est donc nécessaire de l'éliminer. La technique la plus simple pour éliminer ce type d'aliasing est d'appliquer un filtre "2/3" [58] aux séries \hat{a} et \hat{b} avant d'effectuer l'opération de multiplication. Le filtre est de la forme :

$$\Pi_{\frac{2}{3}}^{k} = \begin{cases} 1 \ si \ k \le K_{c} \\ 0 \ si \ k = K_{c} \end{cases}$$
(4.25)

où la fréquence de coupure K_c est choisie telle que

$$K_c < \frac{2K_{max}}{3} = \frac{N}{3} \tag{4.26}$$

Pratiquement, dans une simulation des fluides Newtoniens, le seul inconnu est la vitesse. Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, le comportement du champs de vitesse dans l'espace de Fourier dans une THI est bien étudié : il existe une échelle de coupure, c'est l'échelle de Kolmogorov : Les nombres d'onde, supérieurs au nombre d'onde correspondant à l'échelle de Kolmogorov, déclinent vers zéro très rapidement. Il suffit donc de placer le nombre d'onde de coupure K_c inférieur que le nombre d'onde correspondant à l'échelle de Kolmogorov. Cette condition est équivalente à la condition de la DNS dans l'espace physique : la taille de la maille doit être inférieure à la taille du tourbillon le plus petit.

Par contre, pour les champs de polymères, son comportement en spectral n'est pas connu, l'échelle de coupure est a priori inconnue.

Le technique du filtre 2/3 est la plus simple. Il existe d'autre techniques (phase shifting) qui enlève moins de modes, donc approxime plus précisément la fonction originale en gardant l'erreur d'aliasing nulle [16].

Nous envisageons également un filtre proposé par Hou [36], qui contrôle l'erreur d'aliasing pour ne pas l'amplifier. Cette méthode a été testé avec succès dans les cas qui présentent des discontinuités (écoulement de Burger et Euler 3D [36]). Nous verrons que le filtre de Hou est utilisé pour le polymère dans la méthode de Balci [3]. Nous allons discuter de ce filtre dans la partie suivante.

4.3.4 Oscillations de Gibbs

Les oscillations de Gibbs apparaissent si nous approximons une fonction discontinue (ou avec de très grands gradients) à l'aide du passage dans l'espace de Fourier. Sur la figure 4.1, nous illustrons cet effet si nous essayons d'approximer une fonction porte (discontinue) avec une série de Fourier tronquée à N modes : nous varions le nombre de modes N et comparons la fonction approximée pour les cas N = 32, N = 128 et N = 512 avec la fonction originale.



FIGURE 4.1: Illustration des oscillations de Gibbs

Nous observons que : quand la résolution N augmente, dans le domaine lisse (loin de la discontinuité), les fonctions approximées convergent vers la fonction originale. Mais au niveau de la discontinuité, nous observons que :

- L'amplitude de l'erreur ne diminue pas avec l'augmentation de la résolution (pour N=32,64,128). Nous devons accepter une erreur au niveau de la discontinuité. Cette erreur ne diminue pas avec l'augmentation de la résolution spectrale.
- L'erreur se répercute sur tout le domaine, avec une oscillation sinusoïdale amorti (sinus cardinal) autour de la valeur exacte. L'erreur entache fortement une zone autour de la discontinuité. Cette oscillation diminue avec une meilleure résolution spectrale, donc nous pouvons réduire cette zone en augmentant la résolution spectrale.

Dans notre simulation, ce phénomène a un impact sévère à cause de la nature sans diffusion de l'équation dynamique du polymère. Il faut donc trouver une manière efficace de limiter l'effet de l'oscillation de Gibbs. Augmenter la résolution coûte très cher, donc la solution choisie est de remplacer le filtre "2/3" par un autre filtre proposé par Hou [36].

La formule de ce filtre est :

$$F_H(k) = exp\left(-a\left(\frac{k}{K}\right)^a\right) \tag{4.27}$$

où a est un coefficient de réglage du filtre. Nous prenons a = 36 comme dans le travail de Balci [3]. La figure 4.2 illustre la valeur de ce filtre en fonction du ratio entre nombre d'onde et le nombre d'onde maximal, nous pouvons voir que ce filtre laisse une plage plus large de modes significatifs dans l'espace de Fourier. Sur le figure 4.3, nous constatons également que avec le nouveau filtre, l'oscillation dans l'espace physique est fortement réduite loin de la discontinuité en comparaison avec le filtre classique.

Ce filtre est plus efficace pour la localisation d'erreur si nous le comparons avec le filtrage classique, mais il induit une erreur de type "aliasing". Hou a montré que cette erreur est contrôlable.



FIGURE 4.2: Le filtre de Hou et filtre $\frac{2}{3}$

4.3.5 Application à un modèle 3D

Nous voulons appliquer les techniques présentées précédemment dans un problème 3D. Nous construisons notre domaine d'étude, un cube périodique dont la dimension de chaque côté est : $L_{box} = 2\pi$. Dans ce cube périodique, nous avons pour toutes les fonctions f définies sur \mathbb{R}^3 :

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, x_3) = f(x_1 - a. L_{boite}, x_2, x_3)$$
(4.28)

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, x_3) = f(x_1, x_2 - b.L_{boite}, x_3)$$
(4.29)

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, x_3) = f(x_1, x_2, x_3 - c.L_{boite})$$
(4.30)

où a, b et c sont des nombres entiers quelconques. Avec cette géométrie, nous n'avons pas de problèmes de conditions aux limites. Par défaut notre domaine est homogène isotrope, sauf si nous ajoutons une force directionnelle ou ponctuelle dans l'écoulement. La boite est ensuite discrétisée en N points sur chaque direction.



FIGURE 4.3: Comparaison entre le filtre de Hou et le filtre 2/3

Un champs physique est stocké dans une matrice de taille N * N * N. Pour raison de simplicité, nous choisissons N comme puissance de 2.

Soit un champ discrétisé f_d , nous distinguons la FFT sur les 3 directions :

$$F_x(x_2, x_3)^{k_1} = FFT_x(f_d) = \sum_{n=0}^{N-1} f_d(x_1, x_2, x_3) e^{-\underline{i}2\pi \frac{k_1 x_1}{N}}$$
(4.31)

$$F_y(x_1, x_3)^{k_2} = FFT_y(f_d) = \sum_{n=0}^{N-1} f_d(x_1, x_2, x_3) e^{-\frac{i^2\pi k_2 x_2}{N}}$$
(4.32)

$$F_z(x_1, x_2)^{k_3} = FFT_z(f_d) = \sum_{n=0}^{N-1} f_d(x_1, x_2, x_3) e^{-\underline{i}2\pi \frac{k_3 x_3}{N}}$$
(4.33)

Pour transformer un champ 3D dans l'espace de Fourier, il suffit d'appliquer la FFT 3 fois dans les 3 directions. Par analogie avec une série 1D, les modes de la série de Fourier d'un champ 3D est un vecteur entier et sera noté avec un exposant :

$$FFT_x(FFT_y(FFT_z(f_d))) = \hat{f}^{(k_1,k_2,k_3)}$$
(4.34)

La suite obtenue par la transformée est maintenant une fonction du vecteur $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ que nous appelons vecteur d'onde. Cette transformée est une matrice complexe de taille N * N * N.

Comme nous avons toutes grandeurs physiques réelles, les transformées doivent être de symétrie hermitienne. Toutes les valeurs de $\widehat{f}^{(k_1,k_2,-k_3)}$ peuvent être déduites de la valeur de $\widehat{f}^{(k_1,k_2,-k_3)}$. La taille de la matrice transformée qu'on a besoin de stocker se réduit à $N * N * (\frac{N}{2} + 1)$.

Toutes les dérivations partielles en espace sont simplifiées lorsqu'on est dans

l'espace de Fourier :

$$\frac{\widehat{\partial f}}{\partial_n}^{\boldsymbol{k}} = \underline{i}.k_n \widehat{f}^{\boldsymbol{k}}$$
(4.35)

4.3.6 Parallélisation

En turbulence pour tenir compte de toutes les échelles caractéristiques et a fortiori avec un fluide non Newtonien, qui introduit des échelles supplémentaires, les domaines de calculs deviennent rapidement prohibitifs en temps de calcul et en mémoire. Il est donc nécessaire de partager le travail et la mémoire sur différences processeurs (parallélisation). Pour notre part nous utiliserons un solveur qui utilise la bibliothèque MPI pour gérer cette parallélisation. C'est une parallélisation avec mémoire non partagée. Chaque processeur s'occupe d'une partie du domaine et peut communiquer avec les autres grâce aux fonctions de la bibliothèque. Par simplicité, le nombre de processeurs utilisés est un diviseur de la taille du domaine N. La parallélisation offre une meilleur performance de calcul, mais en même temps rendre certains calculs très coûteuse (par exemple : la suivi particule, la corrélation des points qui se localisent dans les domaines séparé par la parallélisation, etc...)

4.3.7 Equation de Navier-Stokes

Le code qui a été développé au cours de mon travail est basé sur un code pseudo-spectral standard qui résoud initialement la turbulence Newtonienne. Ce code a été pénalisé et validé. Les équations qui décrivent la dynamique du système dans l'espace de Fourier s'écrivent (voir chapitre II) :

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2\right\}\widehat{\boldsymbol{u}} = \mathbf{P}_c \cdot \left(-\nu_f \widehat{\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w}} + \frac{\nu_p i}{\tau_p} \boldsymbol{k} \cdot (\widehat{\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C}})\right)$$
(4.36)

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{C}} + \widehat{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C}} = \widehat{\boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u}} + (\widehat{\nabla \mathbf{u}})^T \cdot \boldsymbol{C} + \frac{1}{\tau} \left(\widehat{\boldsymbol{\mathcal{P}}(\boldsymbol{C})} \widehat{\boldsymbol{C}} - \widehat{\boldsymbol{I}} \right)$$
(4.37)

Rappel de notation

- "·" dénote le produit avec une contraction, example : $\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} = k_i u_i$, ou $\mathbf{C} \cdot (\underline{i}\mathbf{k} \times \mathbf{u}) = C_{im} \underline{i} k_m u_j$
- " \wedge " dénote le produit vectoriel : $\mathbf{k} \wedge \mathbf{u} = k_i u_j \epsilon_{ijk}$, où ε_{ijk} est symbole de Levi-Civita 2.73 :

Même si nous ajoutons un nouveau terme, la pression assure toujours la condition de non-compressibilité grâce au projecteur \mathbf{P}_c .

On note le second membre $SM = \mathbf{P}_c \cdot \left(-\nu_f \widehat{\mathbf{u} \wedge \boldsymbol{w}} + \frac{\nu_{pi}}{\tau_p} \mathbf{k} \cdot (\widehat{\mathcal{P}(C)C}) \right)$

4.4 Équation dynamique du polymère

4.4.1 Formulation classique

Nous avons développé et résolu dans ce travail (cf. chapitre II) les 2 modèles suivants : FENE -P et Olroyld -B. Les équations de ces 2 modèles peuvent être généralisées :

$$\partial_t \boldsymbol{C} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} + \frac{1}{\tau} (\mathcal{P}(\boldsymbol{C}) \cdot \boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
 (4.38)

Où $\mathcal{P}(\mathbf{C})$ est la fonction de Peterlin : — $\mathcal{P}(\mathbf{C}) = 1$ dans le cas du modèle Olroyd-B — $\mathcal{P}(\mathbf{C}) = \frac{L^2 - 3}{L^2 - tr(\mathbf{C})}$ dans le cas du modèle FENE-P

L'équation (4.38) est particulièrement délicat à simuler car c'est une équation hyperbolique sur un tenseur et il peut présenter des chocs, en particulier à haut nombre de Wi. Ces chocs sont problématiques car ils forment des oscillations de Gibbs et le caractère **définie positif du tenseur S peut alors être perdu**. Dans la littérature, il existe plusieurs méthodes pour conserver ce caractère définie positif :

- Méthode de la diffusion artificielle de Beris 1995 [71] qui additionne de la diffusion artificielle à (4.38), cette méthode "populaire" s'adapte à n'importe quel schéma numérique mais ne permet pas d'aller à très haut Wi.
- Méthode du log de l'exponentielle de matrice $\mathbf{E} = e^C$ [28], cette méthode peut résoudre certains problèmes de stabilité numérique mais l'algorithme n'est pas évident à mettre en place et le logarithme n'est pas très stable.
- 2 méthode de décomposition en vecteurs propres et décomposition de Cholesky de Collins (2003) [77] : basée sur une méthode de volume fini, cette méthode est avantageuse car les chocs sont bien traités mais la méthode n'est que d'ordre d'ordre 1 au niveau du choc, elle est quand même diffusive.
- méthode de limiteur de pente de Collins (2006)[78] : le gradient du champ de conformation est limité de manière artificielle à une valeur donnée.
- Méthode de décomposition de Balci de 2011 [3] à partir de la décomposition de **S** en produit de matrice symétrique : cette méthode à l'avantage d'être adaptable en méthode spectrale (en conservant la précision spectrale), elle **conserve toujours le caractère définie positive de C et les chocs apparaissent très finement**. Le phénomène de Gibbs est alors localisé très près des chocs grâce à un filtrage spécial [36] utilisé en présence de singularités. Les oscillations peuvent-être atténués en additionnant une légère diffusion artificielle, plus petite que pour la méthode diffusion artificielle. Cette méthode permet d'atteindre des haut nombre de Wi.

Nous avons choisi la récente méthode de Balci qui permet de garder la précision spectrale ainsi que l'algorithme de parallélisation du code. Cette méthode a été comparé avec d'autre méthodes numériques [18] et a montré sa robustesse. Cette méthode est discutée dans la section suivant.

4.4.2 Formulation par décomposition en racine carré (square root formulation [3])

Nous utilisons la formulation utilisé par Balci couplée avec une diffusion artificielle. Cette méthode permet de réduire considérablement la quantité de diffusion artificielle nécessaire. Pour les cas de faible Weissenberg, nous pouvons éliminer complètement la diffusion artificielle. Cela nous permettra de quantifier l'impact de la diffusion artificielle, en comparaison à un cas de très faible diffusion artificielle. La simulation sans diffusion artificielle demande un pas de temps extrêmement petit pour rester stable. C'est donc beaucoup plus coûteux en terme de temps de calcul. Un autre contrôle possible peut se faire sur la contribution de l'énergie dissipée artificiellement dans le bilan d'énergie final (cf. section 6.3 dans le chapitre VI)

L'idée principale de la méthode introduite par Balci est de décomposer la matrice C en un produit de matrices B et B^T :

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{B}^T \cdot \boldsymbol{B} \tag{4.39}$$

Si C est définie positive il existe une matrice B qui satisfait l'équation (4.39). Cette décomposition admet une infinité de solutions réelles, l'équation dynamique de C peut être déduite de l'équation dynamique de B, où B est la solution de l'équation (4.39) :

$$\partial_t \boldsymbol{B} + \boldsymbol{\mathrm{u}} \cdot \nabla \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B} \cdot \nabla \boldsymbol{\mathrm{u}} + \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{1}{2\tau} (\mathcal{P}(\boldsymbol{B}^T \cdot \boldsymbol{B}) \cdot \boldsymbol{B} - (\boldsymbol{B}^T)^{-1}) \qquad (4.40)$$

où A est une matrice antisymétrique quelconque [3].

Nous pouvons démontrer que l'équation (4.40) implique l'équation (4.38)(voir annexe 7.1)

Nous imposons en plus une condition de symétrie pour \boldsymbol{B} pour que la décomposition soit unique. Cette condition impose un unique valeur de la matrice A qui satisfaire :

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2} \boldsymbol{B}^{-1} \cdot \left((\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{B} - \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{B} \right)$$
(4.41)

Avec une décomposition unique, nous pouvons dire que l'équation (4.40) est équivalente à l'équation (4.38).

En fin, nous devons ajouter une diffusion artificielle de coefficient ν_a pour stabiliser le code [71]. Tous les termes qui servent à calculer la dérivation temporelle sont passés à côté droit de l'équation. La diffusion numérique ajoutée reste à côté gauche dans une schéma semi-implicite, mais elle sera passé à côté droit dans une schéma explicite.

$$(\partial_t + \nu_a \Delta) \boldsymbol{B} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B} \cdot \nabla \mathbf{u} + \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{1}{2\tau} \Big(\mathcal{P}(\boldsymbol{B}^T \cdot \boldsymbol{B}) \boldsymbol{B} - (\boldsymbol{B})^{-1} \Big)$$
(4.42)

On note par la suite le côté droit de l'équation (4.42) SMP.

4.5 Avancement en temps

4.5.1 Schéma implicite et schéma explicite

Un problème de dépendance en temps peut s'écrire sous la forme :

$$\partial_t f = H(f) \tag{4.43}$$

où f est une grandeur dépendante du temps, et H est un opérateur sur f, il peut être décomposé comme la somme d'une partie linéaire et d'une partie non linéaire :

$$H(f) = N(f) + L(f)$$

Supposons que nous sommes à l'itération n pour $t = t_0$ et que nous connaissions les états de f dans le passé. Nous allons discrétiser, puis interpoler la fonction $\partial_t f$ pour trouver la valeur de f à l'itération n + 1. Pour ce faire, nous avons besoin d'évaluer les composants (linéaires et non linéaires) du terme H(f).

Nous évaluons l'itération future de façon implicite ou explicite :

- Une évaluation explicite consiste à interpoler l'itération future en fonction des termes linéaires et non linéaires de l'itération présent et passé n, n-1,
- Une évaluation implicite souvent nécessite un changement de variable pour grouper certains termes avec le champs f dans une seule variable. Cette méthode prend donc en compte ces termes de l'itération future dans l'interpolation.

Pour simplifier la notation, les variables sont considérés en fonction des itérations au lieu du temps. Il y a classiquement 4 types de schémas :

- Complètement explicite : Les 2 parties N(f) et L(f) sont traitées explicitement. Ces schémas sont utilisés dans les simulations des écoulement compressibles (Passot et Pouquet 1987[54], Don et Gottlieb 1990 [24], ...) ou dans les écoulements incompressibles avec viscosité variable.
- Semi-explicite : La partie linéaire L(f) est traitée implicitement et la partie non linéaire est traitée explicitement. Cette méthode est utilisée fréquemment dans la résolution des équations Navier-Stokes et a été implémentée ici dans notre solveur Newtonien.
- Semi-implicite : la partie linéaire L(f) est traitée implicitement, la partie non linéaire est décomposée en 2 parties : N(f) = N1(f) + N2(f) avec N1 linéaire qui est traitée implicitement et N2 non linéaire qui est traitée explicitement. (Forestier et al. 2000[30])
- Complètement implicite : les 2 parties N(f) et L(f) sont traitées implicitement. (Fröhlich et al. 1992 [32])

4.5.2 Schéma avec une étape

Pour mieux comprendre la différence entre le traitement explicite et implicite, nous allons présenter le détail d'un schéma explicite et d'un schéma semi-implicite avec une étape appliquée à la résolution des équations de Navier-Stokes. Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, la dynamique des polymères et du fluide porteur est exprimée par l'équation :

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}} = \nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}} + SM \tag{4.44}$$

où SM est le second membre qui correspond au partie non linéaire (N) (voir 4.3.7) et le terme de diffusion $\nu k^2 \hat{u}$ correspond au partie linéaire (L).

La discrétisation en temps dans un schéma à une étape s'écrit :

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}} = \frac{\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1} - \widehat{\boldsymbol{u}}_n}{\Delta t} \tag{4.45}$$

où \hat{u}_n correspond au champ au temps présent (itération n), et \hat{u}_{n+1} correspond au champ à l'instant juste après (itération n + 1), Δt étant le pas de temps du schéma. On note SM_n et SM_{n+1} respectivement le second membre évalué au itération n et n + 1. Soit θ_L et θ_N sont respectivement les coefficients d'interpolation du terme linéaire et non linéaire de l'équation (4.44), on réécrit l'équation (4.44) comme :

$$\frac{\widehat{\boldsymbol{u}}(n+1) - \widehat{\boldsymbol{u}}(n)}{\Delta t} = \left(\nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}}_n \theta_L + \nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1} (1-\theta_L)\right) + \left(SM_n \theta_N + SM_{n+1} (1-\theta_N)\right)$$
(4.46)

— Dans un schéma complètement explicite $\theta_N = \theta_L = 1$.

$$\frac{\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1} - \widehat{\boldsymbol{u}}_n}{\Delta t} = \underline{i}\nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}}_n + SM_n \tag{4.47}$$

La vitesse à l'instant future (itération n + 1) est :

$$\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1} = \widehat{\boldsymbol{u}}_n + \left(\nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}}_n + SM_n\right) \Delta t \tag{4.48}$$

— Dans un schéma semi-explicite, la partie linéaire $\nu_f \Delta \hat{\boldsymbol{u}}$ est traitée implicitement et la partie non linéaire est traité explicitement ($\theta_N = 1$ et $\theta_L = 0$) : Le traitement implicite consiste à faire une changement de variable en posant :

$$\widehat{\boldsymbol{u}}^* = e^{-\nu_f k^2 \Delta t} \widehat{\boldsymbol{u}} \tag{4.49}$$

La dérivation en temps de la nouveau variable donne :

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}}^* = e^{-\nu_f k^2 \Delta t} \partial_t \widehat{\boldsymbol{u}} - (\nu_f k^2) e^{-\nu_f k^2 \Delta t} \widehat{\boldsymbol{u}} = e^{-\nu_f k^2 \Delta t} \left(\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}} - (\nu k^2) \widehat{\boldsymbol{u}} \right) \quad (4.50)$$

A noté que : à l'itération n, on a $\Delta t = 0$, d'où $\widehat{\boldsymbol{u}}_n^* = \widehat{\boldsymbol{u}}_n$. Donc SM_n n'est pas affecté par le changement de variable. On a le nouveau système à résoudre s'écrit :

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}}^* = SM \tag{4.51}$$

Comme $\theta_N = 1$, on a

$$\frac{\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1}^* - \widehat{\boldsymbol{u}}_n^*}{\Delta t} = SM_n \tag{4.52}$$

On en déduire la $\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1}^*$:

$$\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1}^* = \widehat{\boldsymbol{u}}_n^* + \Delta t S M_n \tag{4.53}$$

Et finalement on retrouve $\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1}$

$$\widehat{\boldsymbol{u}}_{n+1} = \widehat{\boldsymbol{u}}_n^* e^{\nu_f k^2 \Delta t} \approx \widehat{\boldsymbol{u}}_n^* (1 + \nu_f k^2 \Delta t)$$
(4.54)

4.5.3 Schéma multi-étape : Adams-Bashforth

Pour les schémas à plusieurs étapes (nécessitent plusieurs itération dans le passé), on les trouvera présenté dans Peyret [58]. Parmi ces schémas, les schémas Adams Basforth d'ordre 2 et 3 (noté AB2 et AB3) ont été choisis pour être implémentés dans notre solveur Newtonien et dans notre solveur non Newtonien.

Un schéma Adam-Basforth explicite d'ordre k (ABk) s'écrit sous la forme :

$$\frac{f(n+1) - f(n)}{\Delta t} = \sum_{j=0}^{k-1} c_j H(f(n-j))$$
(4.55)

Un schéma Adam-Basforth semi-implicite d'ordre k s'écrit :

$$\frac{f(n+1) - f(n)}{\Delta t} - L(f(n+1)) = \sum_{j=0}^{k-1} c_j N(f(n-j))$$
(4.56)

Les coefficients du schéma AB2 sont : $c_0 = \frac{3}{2}$, $c_1 = -\frac{1}{2}$ Les coefficients du schéma AB3 sont : $c_0 = \frac{23}{12}$, $c_1 = -\frac{16}{12}$, $c_3 = -\frac{5}{12}$ Ce schéma est choisi pour implémenté dans notre simulation.

Nous pouvons traité implicitement le terme diffusion, mais

4.5.4 Stabilité numérique des schémas

Les schémas numériques s'appliquent de la même manière à différentes grandeurs, mais l'étude de stabilité des schémas ne peut pas être considérée séparée de l'équation qui les gouverne.

La stabilité des schémas appliquées à l'équation de Navier-Stokes a été largement étudiée [58] et est bien connue, mais celle de l'équation de conformation est peu connue. Notre système d'équation est constitué de ces deux dynamiques couplées ensemble, donc l'étude de stabilité est beaucoup plus compliquée. Nous pouvons seulement déduire des critères de stabilité par analogie au cas Newtonien et à l'aide de tests.

Généralement, le schéma est stable si le pas de temps est suffisamment petit, les cas de plus faible diffusion nécessitent de plus petit pas de temps. Pour l'équation Navier-Stokes, le pas de temps est choisi basé sur le criète de CFL, mais on peut trouver des criètes plus fine dans [58]. Dans l'équation du polymère, théoriquement, il n'y a pas de diffusion, donc il est naturellement instable numériquement. Il est nécessaire d'ajouter une quantité de diffusion artificielle : plus cette diffusion est faible, plus le résultat est précis, mais le pas de temps doit être très petit. Il faut donc faire plusieurs essais : si le schéma devient instable, nous arrêtons le code et nous le redémarrons avec un pas de temps inférieur.

Comme les dynamiques du polymère et du fluide sont couplées, le pas de temps est le même pour les équations de Navier-Stokes et pour l'équation de conformation. Comme le pas de temps final nécessaire pour stabiliser l'équation de conformation est tellement faible qu'il n'y a pas de différences entre les différentes schémas appliqués aux équations de Navier-Stokes.

4.6 Initialisation

4.6.1 Initialisation du champs de vitesse fluide

Une première façon de générer un champ de vitesse est un bruit aléatoire avec une distribution d'énergie contrôlée à différentes échelles. Pour cela, nous générons les champs de vitesse dans l'espace de Fourier, avec une phase aléatoire et un module prédéfini.

Notre premier étape est de choisir une forme du spectre qui nous convienne. Le spectre initial peut être mis sous la forme :

$$E_k(k) = 16\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k^4 u_{rms}^2}{k_i^5} .\exp\left(-2\left(\frac{k}{k_i}\right)^2\right)$$
(4.57)

où k_i est l'échelle intégrale du champs généré, et u_{rms} est le root-mean-square de la fluctuation de vitesse du champs généré.

Nous pouvons également prendre une autre forme pour le spectre. Par exemple nous pouvons prendre le spectre d'une autre simulation. L'avantage de ce choix est que nous pouvons créer des simulations avec différentes conditions initiales ayant une même densité d'énergie spectrale.

Une fois que la densité spectrale est décidée, nous allons distribuer cette densité de manière homogène sur tout les modes de même longueur d'onde :

$$E_k^{(3D)}(\boldsymbol{k}) = |\boldsymbol{\widehat{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\widehat{u}}^{-\boldsymbol{k}}| = \frac{1}{N_k} E_k(k)$$
(4.58)

où N_k est le nombre de modes présents dans une coquille sphérique S_k : $S_k = \{(\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 | k - \frac{1}{2} < |\mathbf{k}| \le k + \frac{1}{2}\}.$

Il nous reste à générer une direction aléatoire pour chaque vecteur. Le champ de vitesse créé doit aussi satisfaire la condition de non compressibilité suivante :

$$\underline{i}k_n.\widehat{u}_n^{\mathbf{k}} = 0 \tag{4.59}$$

Le vecteur créé \hat{u} doit être perpendiculaire au vecteur d'onde k. Il y a deux méthodes d'initialisation déjà implémentées dans notre code Newtonien :

- La méthode de Staquet [70] : le spectre est placé sur un repère sphérique, la composant radiale doit être nulle. Il reste à générer une composant poloïdale et une composant toroïdale en connaissant leur module.
- La méthode de Rogallo [63] : L'idée est de générer un champs directionnel (longueur unitaire) complètement aléatoire. La direction du vecteur vitesse sera un produit vectoriel de ce vecteur avec le vecteur d'onde \boldsymbol{k} .

Nous pouvons également importer le résultat d'une autre simulation (avec les même paramètres) comme conditions initiales.

4.6.2 Initialisation du champs de conformation

Nous avons seulement deux choix pour initialiser le champs de conformation :

- Si nous voulons que les polymères soit initialement au repos, la matrice de conformation est initialisée et égale à la matrice identité.
- Si nous voulons que les polymères soit initialement étirés, le champ de conformation sera importé d'une autre simulation. Mais contrairement au champs de vitesse, les polymères sont déformés et adaptés au champ de vitesse. Si nous importons le champ de conformation, il est donc nécessaire d'importer le champ de vitesse correspondant.

Nous n'avons pas trouvé une moyenne pour générer de manière aléatoire le champ du tenseur de conformation dans l'espace de Fourier en satisfaisant les contraintes dans l'espace physique (le tenseur de conformation doit rester défini positif).

4.7 Validation

4.7.1 Écoulement de Kolmogorov

Notre premier test est l'écoulement de Kolmogorov ([8] dont nous connaissons une solution analytique. Nous initialisons le champs de vitesse avec un bruit aléatoire, le polymère est initialement au repos, et nous attendons la convergence vers la solution analytique.

Nous avons testé le modèle Olroyld B en 2 dimensions. L'écoulement de Kolmogorov est obtenu avec un forçage sinusoïdal :

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} F_0.cos(k.y)\\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.60}$$

Avec ce forçage, le système admet une solution stationnaire :

$$u = \begin{pmatrix} U_0 \cos(ky) \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.61}$$

$$S^{analytique} = \begin{pmatrix} 1 + 2U_0^2 k^2 W i^2 sin^2(ky) & -W i U_0 k sin(ky) \\ -W i U_0 k sin(ky) & 1 \end{pmatrix}$$
(4.62)

où $U_0 = \frac{1}{\nu(s+1)k^2} F_0.$

Cette solution est stable avec le jeux de paramètres suivant [8] :

$$Wi = 2, Re = 0.5, s = 0.5, k = 1, F_0 = 1$$

Nous démarrons le système avec une vitesse initiale nulle. Le tenseur de conformation est initialement égal à la matrice identité. Nous observons une convergence en temps vers la solution analytique. Nous arrêtons le programme une fois que le calcul est convergé, i.e. : la différence entre 2 itérations successives est très faible :

$$\operatorname{Max}(\|S_{i,j}^{n+1} - S_{i,j}^{n}\|) < 10^{-14}$$
(4.63)

Nous comparons la solution convergée avec la solution analytique :

Erreur absolue =
$$Max(||S_{1,1}^{n+1} - S_{1,1}^{analytique}||)$$
 (4.64)

Tous les méthodes convergent bien vers la solution analytique lorsque la résolution augmente (figure 4.4).



FIGURE 4.4: Convergence de l'erreur numérique en fonction de la résolution et de la méthode numérique

4.7.2 Écoulement cellulaire

C'est un cas test classique [3] si nous voulons solliciter uniquement le solveur du polymère. Dans ce test, nous considérons un écoulement de Stokes, où la viscosité est considérée très grande.

L'idée de cette vérification est de tester uniquement la partie "visco-élastique" dans une condition extrême c'est à dire avec une **turbulence purement élastique**. Cela correspond à un **haut nombre** Wi. Comme dans [3], on considère un écoulement de Stockes pour la vitesse, où le nombre de Reynolds est faible (Re = 0), l'équation dynamique des fluides ([3]) est remplacée par :

$$\nabla p = \nu_f \Delta \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{S}) + \mathbf{f} \tag{4.65}$$

L'écoulement est forcé par des tourbillons de Taylor Green :

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} -2.sin(x).cos(y)\\ 2.cos(x).sin(y) \end{pmatrix}$$

Comme décrit dans [3], nous observons bien une transition d'un régime stationnaire à un régime instationnaire chaotique pour un haut nombre Wi = 15.

Nous avons testé les deux méthodes avec les même paramètres physiques et la même résolution de 512^2 points :

- une faible diffusion artificielle de 0.001 dans le cas de la méthode artificielle (voir figure 4.5).
- sans diffusion artificelle pour la méthode de Balci 4.4.2 choisie dans notre cas (voir figure 4.6).

Il est normal de ne pas avoir les même résultats figures 4.5 et 4.6 puisque le régime est chaotique. Une infime variation due à la différence de méthode, sera amplifiée. On observe alors que globalement les figures sont symétriques par rapport au centre du domaine.

Par contre, au regard des deux figures 4.5 et 4.6, nous pouvons conclure que tout en préservant le caractère définie positif, la méthode de **Balci (figure 4.6)** capture mieux les discontinuités que la méthode avec une très faible diffusion artificielle (figure 4.5). Comme dans [3], nous observons des oscillations de Gibbs mais localisées autour des chocs. Ces oscillations pourront être supprimées via une très légère diffusion artificielle dans le cas 3D.



FIGURE 4.5: Simulation pour la méthode diffusive :(a),(c),(e) : champs de vorticité à t=10,70 et 140 s. (b),(d),(f) : champs de la trace du tenseur de conformation $tr(\mathbf{S})$ à t=10,70 et 140 s.



FIGURE 4.6: Simulation pour la méthode de Balci :(a),(c),(e) : champs de vorticité à t=10,70 et 140 s. (b),(d),(f) : champs de la trace du tenseur de conformation $tr(\mathbf{S})$ à t=10,70 et 140 s.

4.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté comment les grandeurs physiques sont modélisées, et manipulées. Le solveur a été testé et validé par différents cas tests à l'aide de l'écoulement de Kolmogorov et l'écoulement célulaire.

Dans la suite, les approximations numériques seront omises, les champs dans l'espace physique sont traités comme des fonctions continues, mais les champs dans l'espace de Fourier sont discrets.

Chapitre 5

Dimensionnement et statistique

Sommaire

5.1	Introduction			
5.2	Les	paramètres et configurations des simulations 106		
	5.2.1	Les choix des paramètres 106		
	5.2.2	Choix de configuration		
5.3	Les	échelles caractéristiques et les grandeurs notables 109		
5.4	Ana	lyse statistique appliquée au fluide Newtonien 112		
	5.4.1	Temps de cohérence 112		
	5.4.2	Vérification de l'isotropie		
	5.4.3	L'effet du forçage		
	5.4.4	L'effet du nombre de Reynolds		
5.5	5.5 Analyse statistique appliquée au fluide Non Newto-			
	nien	$\mathbf{ne} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $		
	5.5.1	Vérification de l'isotropie 121		
	5.5.2	Comparaisons entre Newtonien et Non Newtonien \dots 121		
5.6	Extension des polymères			
5.7	Étirement global des polymères par le fluide 125			
5.8	Influence des polymères sur la dissipation et la réduc-			
	tion	de traînée		
5.9	Con	clusion		
5.1 Introduction

Comme la simulation numérique ne peut contenir qu'un nombre limité d'échelles, choisir le bon jeu de paramètres est très important pour observer les mécanismes souhaités. Nous voulons observer 3 différents mécanismes : la force visqueuse, la convection (transfert non linéaire), et l'effet du polymère. Dans ce chapitre, nous allons discuter sur le choix des paramètres, et des analyses statistiques classiques dans une étude d'un écoulement turbulent et de l'influence de la présence de polymères.

5.2 Les paramètres et configurations des simulations

5.2.1 Les choix des paramètres

Rappelons que la dynamique du système à simuler est décrite par les équations suivantes (voir chapitre III -section 3.6.5) :

$$\partial_t \mathbf{u} + \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{u} = -\nabla p + \nu_f \Delta \mathbf{u} + \left(\frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot (\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C})\right) + \boldsymbol{f}$$
(5.1)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{5.2}$$

$$\partial_t \boldsymbol{C} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} + \frac{1}{\tau_p} \Big(\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C} - \boldsymbol{I} \Big)$$
 (5.3)

Le système contient 4 paramètres : ν_f est la viscosité du solvant, ν_p est la contribution du polymère sur la viscosité à cisaillement nul (voir chapitre II-Section 3.6.7), τ_p est le temps de relaxation du polymère, et L_{max} est l'extension maximale (normalisée) du polymère. $\mathcal{P}(\mathbf{C})$ est une correction non linéaire de la raideur quand les polymères s'étirent près de la limite L_{max} :

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{C}) = \frac{L_{max}^2}{L_{max}^2 - C_{ii}} \tag{5.4}$$

Les phénomènes en turbulence suivent une loi d'échelle ou loi de similitude : les différents systèmes se comportent de la même manière si les nombres adimensionnels sont les mêmes. Les choix des unités sont donc arbitraires, et les valeurs numériques des paramètres utilisés ne sont pas nécessairement correspondant à leur valeur réelle. Notre problème a 4 nombres adimensionnels qu'on rappelle ici :

- Le nombre de Reynolds (voir chapitre II)
- Le nombre de Weissenberg (voir chapitre III)
- Le ratio de contribution du polymère à la viscosité au repos sur la viscosité du solvant $s = \frac{\nu_p}{\nu_f}$. Nous pouvons utiliser également le nombre $\beta = \frac{\nu_f}{\nu_f + \nu_p} = \frac{\frac{s}{r+1}}{\frac{s}{r+1}}$
- $\frac{s}{s+1}$ — Le ratio entre l'extension maximale du polymère sur sa taille au repos : $L_{max} = \frac{R_{max}}{R_0}$

Comme nous l'avons vu au le chapitre II, le modèle FENE-P introduit un mécanisme non linéaire afin de simuler l'effet de blocage quand le polymère est étiré jusqu'à sa limite d'extension. Cet effet non linéaire complexifie beaucoup les analyses. Dans le cadre de ce travail, nous allons choisir les paramètres afin d'éviter ce mécanisme non linéaire, pour mieux comprendre les autres mécanismes dans le système. Pour ce faire, il suffit de choisir la valeur de L_{max} grande, ici L_{max} est fixée égale à à 15 (comme dans [3]). Cette valeur choisie n'est pas irréaliste (voir chapitre II), tout en laissant une gamme d'étirement important pour que l'extension de la majorité de notre population de polymères soit encore loin de cette limite. Avec ces conditions, l'effet non linéaire introduit par la fonction de Peterlin est négligé $\mathcal{P}(\mathbf{C}) \approx 1$ dans le calcul d'énergie élastique.

Nous voulons étudier les interactions entre tous les mécanismes présents dans la turbulence : le transfert non linéaire d'énergie, la dissipation visqueuse et les effets de polymères. Nous voulons donc que le domaine inertiel et le domaine dissipatif coexistent dans notre simulation. Mais notre résolution spectrale est limitée, si nous laissons la place pour le domaine dissipatif, le domaine inertiel doit être plus étroit. Pour ce faire, nous choisissons un nombre de Reynolds relativement faible si on se compare à une simulation classique où le domaine inertiel occupe entièrement le domaine spectral.

Pour que l'effet du polymère ne soit pas trop grand, ni trop faible, nous choisissons un polymère qui a un temps de relaxation du même ordre de grandeur que le temps de turbulence soit : $Wi \approx 1$ et en faible concentration tel que $s \approx 0.1$ (avec la valeur de β correspondant : $\beta \approx 0.9$). La concentration choisie est dans la régime dilué (voir chapitre III).

5.2.2 Choix de configuration

Nous pouvons avoir deux choix possibles pour la dynamique des fluides :

- Turbulence forcée : l'avantage est que, quand le système atteint l'état stationnaire, nous pouvons utiliser l'hypothèse d'ergodicité pour calculer les grandeurs statistiques et obtenir une très bonne convergence statistique. L'inconvénient de cette configuration est qu'elle peut contenir des mécanismes sensibles au forçage choisi. Un seul forçage n'est pas suffisant pour conclure une observation. Nous avons donc implémenté deux différents forçages :
 - Forçage stochastique (noté S) proposé par Chen et al.[17]. Ce forçage consiste à fixer la somme d'énergie de tous les modes dans des coquilles sphériques $S_k = \{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 | k 0.5 < |\mathbf{k}| \le k + 0.5 \}$ à des valeurs constantes $E_k^0(k)$ imposées. A chaque pas de temps, nous calculons la somme d'énergie pour chaque coquille :

$$E_k(k) = \sum_{k \in S_k} \frac{1}{2} |\widehat{\boldsymbol{u}}^2| \tag{5.5}$$

et nous multiplions tous les modes de cette coquille par une même constante $\frac{E_k^0(k)}{E_k(k)}$ afin d'obtenir la somme d'énergie fixée à chaque pas de temps. Cette configuration est notée avec la lettre "a"

 Forçage déterministe de type ABC[49]. Ce forçage consiste à ajouter une force volumique déterministe dans la turbulence. Cette force s'écrit :

$$f_{ABC} = f_0 \begin{pmatrix} C_2 cos(k_F y) + C_3 sin(k_F z) \\ C_1 cos(k_F x) + C_3 sin(k_F z) \\ C_1 cos(k_F x) + C_2 sin(k_F y) \end{pmatrix}$$
(5.6)

Avec :

- f_0 est l'amplitude de forçage, qui est choisie afin d'assurer d'obtenir la même quantité énergie en moyenne en comparaison avec le forçage stochastique.
- C_1 , C_2 et C_3 sont des paramètres supplémentaires pour avoir des forçages différents suivant 3 directions $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ et \boldsymbol{z} . Dans notre cas, ils sont tous égaux à 1
- k_F est le mode de Fourier où nous injectons l'énergie.

La particularité de ce forçage est qu'il n'est pas isotrope : il injecte une hélicité dans l'écoulement (une corrélation non nulle entre le champs de vorticité et le champs de vitesse). L'hélicité brise la symétrie miroir, et donc viole partiellement l'hypothèse d'isotropie. De nos jours, son effet sur la turbulence Newtonienne n'est pas entièrement compris, et est étudié [48, 44]. L'objectif de cette thèse n'est pas de comprendre l'interaction entre l'hélicité et la dynamique des polymères, mais ce forçage peut nous aider à quantifier la validité de l'extension de notre argument à une configuration non homogène et anisotrope. Cette configuration est notée avec la lettre "b". Le forçage ABC n'est pas non plus homogène : l'intensité de forçage est localisée sur des pics fixés dans l'espace.

- Turbulence en décroissance : l'avantage est que, les mécanismes dans le système sont propres à la turbulence et au polymère. Nous pouvons également trouver des propriétés analogues entre la turbulence en décroissance dans une boîte de THI périodique et la turbulence au coeur d'un canal. L'inconvénient est que, nous ne pouvons pas moyenner en temps, pour avoir une bonne convergence statistique. Il faudra faire une moyenne de réalisations, ce qui est très coûteux en terme de temps de calcul. En autre, la condition initiale peut également avoir une influence sur les grandeurs statistiques. Nous avons donc également préparé 2 types de déclins avec des conditions initiales différentes :
 - Configuration "c" : les champs initiaux sont issus des champs stationnaires d'une autre simulation forcée (configuration a ou b) de même paramètres. Si la condition initiale est un cas Newtonien, les polymères sont initialisés comme s'ils étaient au repos (C = I). Les différents cas de cette configuration se distinguent aussi par leur configurations initiale (IC).
 - Configuration "d" : le champ de vitesse initial est généré de manière aléatoire avec une distribution d'énergie échelle par échelle identique avec le champ initial dans la configuration "c". Les polymères sont initialement au repos (C = I)

Pour chaque configuration nous effectuons une simulation de fluide Newtonien avec

	T 1		/		0	<u> </u>
Cas	Type de	ν_f	ν_f/ν_a	$ au_p$	β	Condition initiale
	forçage	$\times 10^{-2}$				
a1	S	1.25	-	-	-	-
a2	S	1.25	1250	0.5	0.909	-
a3	S	2.5	2500	0.5	0.909	-
a4	S	1.25	1250	0.5	0.833	-
a5	S	1.25	1250	0.75	0.909	-
a6	S	0.125	-	-	-	-
b1	ABC	1.25	-	-	-	-
b2	ABC	1.25	1250	0.5	0.909	-
c1	aucun	1.25	-	-	-	al
c2	aucun	1.25	1250	0.5	0.909	a1
c3	aucun	1.25	1250	0.5	0.909	b1
d1	aucun	1.25	-	-	-	Bruit synthétique
d2	aucun	1.25	1250	0.5	0.909	Bruit synthétique

 TABLE 5.1: Paramètres principaux des différents cas

la numérotation "1". Nous avons également fait varier les 3 paramètres principaux pour la configuration "a" pour étudier les effets des paramètres. Le tableau 5.1 récapitule les cas analysés dans ce chapitre. Rappelons que ν_a est la diffusion artificielle que nous ajoutons dans l'équation dynamique de polymère.

5.3 Les échelles caractéristiques et les grandeurs notables

Dans cette partie nous allons étudier les grandeurs statistiques globales de notre système.

Nous calculons les grandeurs importantes suivantes (voir chapitre II et III) :

- Énergie cinétique totale : $e_K = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}^2 \rangle$
- Énergie élastique totale : $e_p = \tilde{K_p} \langle C_{ii} \rangle$ où $K_p = \frac{\nu_p}{2\tau_p}$
- Dissipation par effet visqueux $\epsilon_f = \nu_f \langle \partial_j u_i \partial_i u_j \rangle$
- Dissipation par la relaxation du polymère $\epsilon_p = \frac{K_p}{\tau_p} \langle C_{ii} 3 \rangle$
- Extension relative des polymères par rapport à la limite $\frac{\langle C_{ii} \rangle}{L_{max}^2}$

Comme nous l'avons vu au chapitre II, il y a 3 échelles importantes en turbulence que nous rappelons ici : échelle intégrale L_K , échelle de Taylor λ et échelle de Kolmogorov η , dont l'expression est rappelée ici (voir chapitre II) :

$$L_{K} = \int_{0}^{\infty} \frac{k^{-1} E_{K}(k)}{E_{K}(k)} dk$$
(5.7)

$$\lambda = \frac{15\nu_f u_{rms}}{\epsilon_f} \tag{5.8}$$

$$\eta = (\nu_f^3 \ \epsilon_f)^{1/4} \tag{5.9}$$

Pour la dynamique des polymères, nous introduisons les échelles de De Gennes (L_{DG}) (voir à la fin du paragraphe 6.3.2). et Lumley (L_L) (voir définition dans chapitre II-section 3.7). L'extension des polymères est caractérisée par 2 nombres de Weissenberg Wi_L et Wi_{η} basés respectivement sur le temps intégral et temps de Kolmogorov :

$$Wi_L = \frac{\tau_p}{t_L} = \frac{\tau_p u_{rms}}{L_K} \tag{5.10}$$

$$Wi_{\eta} = \frac{\tau_p}{t_{\eta}} = \tau_p \sqrt{\frac{\epsilon_f}{\nu_f}} \tag{5.11}$$

Nous introduisons également une échelle intégrale du champ de conformation de façon similaire à l'échelle intégrale de la turbulence. Par analogie avec L_K , cette échelle peut également être calculée dans l'espace spectral par :

$$L_p = \int_{k=0}^{\infty} \frac{k^{-1} E_p(k)}{E_p(k)} dk$$
 (5.12)

où $E_p(k)$ est le spectre d'énergie élastique du polymère. Nous allons définir ce spectre dans le chapitre suivant (cf. chapitre V). Les échelles sont présentées au tableau 5.2

Nous introduisons également dans le tableau 5.3 la moyenne normalisé et la variance ($\sigma_{C_{ii}} = \langle C_{ii}^2 \rangle$) de la trace de tenseur de conformation, afin d'estimer l'extension des polymères.

Cas	L_K	L_p	λ	η	l_L	l_{DG}
a1	0.672	-	0.626	0.0516	-	-
a2	0.687	0.222	0.579	0.0548	0.164	0.0478
a3	0.690	0.255	0.737	0.0870	0.184	0.0942
a4	0.693	0.226	0.643	0.0555	0.221	0.0555
a5	0.647	0.203	0.610	0.0542	0.168	0.0544
a6	0.483	-	0.187	0.00858	-	-
b1	0.806	-	0.746	0.0656	-	-
b2	0.795	0.276	0.771	0.0677	0.108	0.0531
c1	0.781	-	0.733	0.0655	-	-
c2	0.707	0.195	0.568	0.0602	0.136	0.0465
c3	0.858	0.01812	0.7490	0.0738	0.0906	0.0181
d1	0.716	-	0.563	0.0622	-	-
d2	0.725	0.204	0.577	0.0635	0.123	0.0583

TABLE 5.2: Les échelles importantes pour nos cas simulés

Cas	e_K	ϵ_{f}	ϵ_p	Wi_L	Wi_{η}	$\frac{\langle C_{ii} \rangle}{(L_{max})^2}$	σC_{ii}
a1	0.738	0.275	-	-	-	-	
a2	0.678	0.216	0.0295	0.5940	2.079	6.58%	12.6
a3	0.592	0.272	0.0348	0.5574	1.650	4.43%	7.86
a4	0.678	0.205	0.0551	0.5941	2.026	6.24%	12.2
a5	0.673	0.226	0.0513	0.9510	3.188	15.10%	28.3
a6	1.007	0.361	-	-	-	-	-
b1	0.470	0.1056	-	-	-	-	-
b2	0.441	0.0927	0.0105	0.4177	1.361	3.20%	5.7
c1	0.397	0.1616	-	-	-	-	-
c2	0.383	0.1484	0.0154	0.4378	1.723	4.06%	7.4
c3	0.294	0.0656	0.0086	0.3163	1.145	2.88%	4.4
d1	0.331	0.1303	-	-	-	-	-
d2	0.320	0.1204	0.0143	0.3899	1.551	3.48%	5.0

TABLE 5.3: Compilation des grandeurs notables des simulations Newtoniennes et Non-Newtoniennes

5.4 Analyse statistique appliquée au fluide Newtonien

Nous allons d'abord effectuer une première série d'analyses préliminaires afin de s'assurer que les hypothèses posées sont bien vérifiées et identifier les effets non liés au polymère. Les analyses abordées dans le cadre de cette thèse se limitent aux statistiques en 1 point et en 2 points.

Pour les analyses en 1 point, nous pouvons "calculer" directement la fonction de densité de probabilité (probability density function (PDF)) avec un temps de calcul raisonnable. A partir de la PDF, nous pouvons déduire tous les moments statistiques. En général, la PDF est approximée par un histogramme (normalisé) des événements : plus le nombre des échantillons pris en compte est important, plus l'histogramme approche la vraie PDF. Nous pouvons compter les événements présents dans notre boite de turbulence à un instant donné avec une convergence statistique de l'ordre de 10%. Pour avoir une meilleure convergence statistique, il faut compter les événement en plusieurs instants bien séparés en temps. Si nous avons un état stationnaire (dans les cas de turbulence forcée), il suffit de construire l'histogramme basé sur des champs bien séparés en temps. Dans les cas de turbulence en déclin, nous devons répéter les simulations avec des conditions initiales différentes, les conditions initiales sont des états de l'écoulement forcé correspondant qui sont bien séparés en temps.

Pour les analyses en 2 points, la PDF dépend d'une variable supplémentaire qui est la distance séparant ces 2 points. Donc effectuer un calcul de PDF pour chaque distance de séparation devient très contraignant en temps de calculs. Nous nous limitons au calcul de corrélation (moment statistique d'ordre 1).

5.4.1 Temps de cohérence

En turbulence, nous pouvons observer très clairement la formation de tourbillons de différentes tailles. Malgré le fait que ce phénomène soit difficile à traduire en termes d'objets mathématiques, il se manifeste assez clairement à l'aide des corrélations spatio-temporelle. Les points qui se trouvent dans un même tourbillon ont un fort lien causal, qui se traduit par une corrélation spatiale significative. De même, la corrélation de 2 points séparées en temps montre le lien causal entre eux :

$$\phi(t) = \langle \mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t_0) \cdot \mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t+t_0) \rangle_{\boldsymbol{x}}$$
(5.13)

où la moyenne est souvent prise en espace pour tous les x présents dans notre boîte périodique. Sur la figure 5.1, nous présentons l'évolution de la corrélation temporelle. En pratique, pour le cas de forcing, comme la convergence statistique n'est jamais parfaite, la corrélation temporelle ne décroit pas vers zéro mais elle peut osciller autour de zéro avec une amplitude de l'ordre de celle de la convergence statistique.

Nous constatons que pour le cas b1, la corrélation ne décroit pas vers zéro, le champ de vitesse reste corrélé. C'est un effet particulier du forçage ABC, qui injecte constamment une quantité d'énergie non homogène à l'écoulement.



FIGURE 5.1: Correlations temporelles des différents cas (trait continu) en fonction du temps normalisé t/t^R . Le trait discontinu vertical indique le temps de décorrelation normalisé t^*/t^R

Un résultat immédiat que nous pouvons tirer de cette grandeur statistique (sauf pour le cas b1) est une échelle caractéristique en temps où au delà de ce temps, la corrélation temporelle est pratiquement nulle (de l'ordre de la convergence statistique), donc tous les points sont statistiquement indépendants. Ce temps caractéristique peut être défini comme :

$$t^* = \int_{t=t_0}^{\infty} \phi(t)dt \tag{5.14}$$

Avec ce résultat, nous pouvons prendre 2 instants, séparés en temps de plus de t^* , comme 2 échantillons statistiquement indépendants. Ce temps de cohérence est un temps caractéristique des grandes échelles, donc il est du même ordre d'amplitude que le temps de retournement calculé par :

$$t^R = \frac{L_K}{u_{rms}} \tag{5.15}$$

Avec $u_{rms} = \sqrt{\langle \mathbf{u}^2 \rangle}$.

Nous constatons que les champs (sauf le cas b1) sont totalement décolérés après un temps $\Delta t \approx t^* \approx 2t^R$.

5.4.2 Vérification de l'isotropie

Nous effectuons cette étude préliminaire d'abord en fluide Newtonien. Dans une turbulence, l'isotropie ne peut pas être démontrée strictement en utilisant



FIGURE 5.2: Comparaison des 4 fonctions $\frac{r}{2} \frac{\partial f_y(r)}{\partial r}$ (blue line), $\frac{r}{2} \frac{\partial f_z(r)}{\partial r}$ (green line), $g_y(r)$ (red line) et $g_z(r)$ (cyan line) de cas (a1)-figure a et cas (b1)-figure b

la définition, elle doit être acceptée comme une hypothèse et nous estimons la déviation de comportement prévu des statistiques par la théorie. Cette erreur sera considérée comme indicateur de l'isotropie.

En général, les grandes échelles peuvent être temporellement anisotropes, mais a priori, nous devons observer un retour vers l'isotropie aux plus petites échelles. Donc les indicateurs globaux sont plus stricts que les indicateurs séparant les différentes gammes d'échelles. Or, nous nous intéressons aux mécanismes des petites échelles, et nous avons besoin d'un indicateur de l'isotropie échelle par échelle.

Ici, nous proposons un indicateur le plus simple, qui sont les fonctions de corrélation transversale et longitudinale f et g, dont l'expression est déjà présentée dans le chapitre II. L'hypothèse d'isotropie implique que ces fonctions sont indépendantes de la direction du vecteur de séparation \mathbf{r} . Elles sont fonction de la distance de séparation $\mathbf{r} = |\mathbf{r}|$. Par raisons de temps de calcul, nous ne pouvons calculer les fonctions f et g pour toutes les directions de \mathbf{r} , et comparer. Nous choisissons 2 directions particulières $\mathbf{r} = r.\mathbf{y}_0$ et $\mathbf{r} = r.\mathbf{z}_0$ (qui sont les moins couteuses en termes de calcul) parmi une infinité de directions possibles de \mathbf{r} . Nous calculons donc 4 fonctions de corrélations :

$$f_y(r) = \frac{\langle u_y(x, y+r, z). u_y(x, y, z) \rangle_{\boldsymbol{x}, t}}{\langle u_y(x, y, z)^2 \rangle}$$
(5.16)

$$f_z(r) = \frac{\langle u_z(x, y, z+r) . u_z(x, y, z) \rangle_{\boldsymbol{x}, t}}{\langle (u_z(x, y, z))^2 \rangle}$$
(5.17)

$$g_y(r) = \frac{\langle u_z(x, y+r, z). u_z(x, y, z) \rangle_{\boldsymbol{x}, t}}{\langle u_z(x, y, z)^2 \rangle}$$
(5.18)

$$g_z(r) = \frac{\langle u_y(x, y, z+r) . u_y(x, y, z) \rangle_{\boldsymbol{x}, t}}{\langle (u_y(x, y, z))^2 \rangle}$$
(5.19)

Le symbole $\langle * \rangle_{\boldsymbol{x},t}$ signifie que la moyenne est prise dans l'espace (pour tous les \boldsymbol{x}) et en temps (plusieurs instants séparés sont pris en compte dans la moyenne). Si

nous avons une isotropie à une échelle r donnée, nous devons obtenir les égalités suivants :

$$f_y(r) = f_z(r) = f_d(r)$$
 (5.20)

$$g_y(r) = g_z(r) = g_d(r)$$
 (5.21)

où f(r) et g(r) sont les fonctions de corrélations, respectivement, transversale et longitudinale suivant une direction quelconque. En plus, l'hypothèse d'isotropie conduit à une relation exacte entre f et g (voir chapitre II 2.3.7)

$$g(r) = f(r) + \frac{r}{2} \frac{\partial f(r)}{\partial r}$$
(5.22)

Il suffit donc de tracer les 4 fonctions $\frac{r}{2} \frac{\partial f_y(r)}{\partial r}$, $\frac{r}{2} \frac{\partial f_z(r)}{\partial r}$, $g_y(r)$ et $g_z(r)$ sur un même graphique, et observer une zone où les 4 courbes sont bien superposées.

A priori, l'action des polymères est isotrope, le seul élément dans notre système pouvant causer l'anisotropie est le forçage. Cela nous ramène à comparer l'isotropie entre les cas a1 et b1, tout en gardant en esprit que le forçage ABC utilisé dans le cas b1 est un forçage non isotrope.

Sur la figure 5.2, nous observons que le forçage stochastique (cas a1) que nous utilisons donne une isotropie assez bonne jusqu'à 30η . Or, le forçage ABC (cas b1) n'est pas isotrope à toutes les échelles.

5.4.3 L'effet du forçage

Dans la littérature, nous constatons que en général, les forçages localisés en grandes échelles n'ont pas un impact significatif sur les PDFs. Les résultats dans la littérature montrent une PDF Gaussienne pour les composantes de la vitesse. Dans notre simulation, nous observons un comportement Gaussien pour les valeurs de $|\mathbf{u}| < 3\sigma_{\mathbf{u}}$. Au delà un manque de statistique peut expliquer l'écart à la Gaussienne

Dans ce paragraphe, nous allons caractériser les influences des forçages utilisés dans nos simulations. Le forçage est souvent un processus non naturel mais permet de créer un état stationnaire en temps, et donc de remplacer la moyenne de réalisation par une moyenne en temps. Nous devons accepter que le forçage modifie les statistiques aux échelles du forçage, et nous vérifions a posteriori les effets des forçages utilisés sur les statistiques aux plus petites échelles. Pour cela, nous allons comparer 2 cas avec différents types de forçage (case a1 et case b1).

Nous pouvons également comparer la turbulence forcée avec une turbulence en décroissance, en gardant tous les paramètres mais en déactivant seulement le forçage : le cas c1 correspond au déclin à partir de cas a1, le cas c3 correspond au déclin à partir de cas b1. Pour une turbulence en décroissance, les effets apportés par les forçages sont, a priori, "oubliés" par le système après un certain temps de l'ordre de t^* .

La première quantité que nous considérons est la distribution de la vitesse. Sur la figure 5.3(a) et 5.3(b), nous présentons 2 cas de turbulences forcées , avec les paramètres de forçage choisis tels que le nombre Re_{λ} oscille proche de 30. Nous présentons également le même résultat en déclin après 1 temps de retournement des cas correspondants sur les figures 5.3(c) et (d)



FIGURE 5.3: Comparaisons des PDFs des 3 composantes de vitesse suivant 3 directions Cartésiennes $\mathbf{x_0}, \mathbf{y_0}$ et $\mathbf{z_0}$ pour : cas al-figure a, cas bl-figure b, cas cl-figure c, cas c3-figure d

Nous allons ensuite comparer la PDF de l'incrément de vitesse (InV), car c'est une grandeur importante que nous pouvons le relier avec l'accélération du fluide. L'incrément de vitesse est défini comme suit :

$$\delta \mathbf{u}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{x}, t) = \mathbf{u}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{x}, t) - \mathbf{u}(\boldsymbol{x}, t)$$
(5.23)

Comme nous avons un système homogène et isotrope, le choix de l'orientation du vecteur \mathbf{r} , a priori, n'influence pas le résultat. Nous pouvons limiter l'orientation de \mathbf{r} suivant les 2 directions de \mathbf{y} et \mathbf{z} pour une raison technique¹.

Nous admettons l'hypothèse de l'homogénéité, l'histogramme compte les valeurs $\delta \mathbf{u}$ pour tous les \mathbf{x} présents dans la boite de turbulence, et en plusieurs t différents.

Nous pouvons calculer les PDFs des 3 composantes δu_x , δu_y , δu_z pour toutes les échelles, avec le vecteur de séparation \mathbf{r} suivant les 2 directions \mathbf{e}_y et \mathbf{e}_z (Les directions \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y et \mathbf{e}_z sont les 3 directions qui forment la base Cartésienne). Toutes

^{1.} la parallélisation suivant la direction \mathbf{x} implique que les opérations suivant cette direction nécessitent un échange de données entre les processeurs et donc augmentent le coût de calcul.



FIGURE 5.4: Comparaison des PDFs des IVs longitudinaux : forcage vs déclin : 4 cas présentés : (a)- cas a1, (b)- cas b1, (c)- cas c1, (d)- cas c3

les PDFs calculées sont présentées dans l'annexe (Voir section 7.5 : les figures 7.1 (cas a1), 7.2 (cas b1), 7.3 (cas c1), et 7.5 (cas c3)).

Parmi les 6 InV calculés, nous distinguons 2 InV qui sont longitudinaux $\delta u_y(r\mathbf{e_y})$ et $\delta u_z(r\mathbf{e_z})$ et 4 InV qui sont transversaux $\delta u_x(r\mathbf{e_y})$, $\delta u_x(r\mathbf{e_z})$, $\delta u_y(r\mathbf{e_z})$ et $\delta u_z(r\mathbf{e_y})$. A priori, l'isotropie implique que les PDF des incrément de vitesse transversale (InVT) sont identiques, et les PDFs des incrément de vitesse longitudinale (InVL) le sont également. Nous présentons donc un InVT ($\delta u_x(r\mathbf{e_y})$) parmi les 4 InVT sur la figure 5.5 et un InVL($\delta u_y(r\mathbf{e_y})$) parmi les 2 InVL sur la figure 5.5

Les résultats sur les InV sont classiques [50]:

- Les InVT sont similaires, avec une forme symétrique ("Skewness" presque nul), les PDF sont Gaussiennes pour les grandes valeurs de r et de forme exponentielle pour les faibles valeurs de r
- Les InVL sont similaires, avec une forme non symétrique ("Skewness" non nulle), les PDF sont Gaussiennes pour les grandes valeurs de r et une forme exponentielle pour les faibles valeurs de r

Pour affiner ces comparaisons de PDF, nous pouvons tracer l'évolution du skewness et du flatness en fonction de l'échelle de séparation (voir figure 5.6). Nous pouvons émettre les premiers constats suivants :



FIGURE 5.5: Comparaisons des PDFs des IVs transversale : forcing vs déclin : 4 cas présenté : (a)- cas a1, (b)- cas b1, (c)- cas c1, (d)- cas c3

- Les skewness des InVL (figure5.6a) et les flatness des InVL et InVT (figure 5.6c,d), pour les cas a1, b1, c1, c3, ont des allures similaires, sauf au niveau des grandes échelles du cas b1 (forçage ABC). Cela renforce l'hypothèse que les forçages n'ont pas une grande influence sur les statistiques des petites échelles. L'exception du cas b1 était prévue [49], mais la différence comparée aux autres cas n'est pas dramatique.
- Si l'isotropie est bien respectée, pour une valeur de l'InVT donnée, il existe une valeur de l'InVT directement opposée, et la probabilité de ces 2 valeurs de l'InVT doit être égale. Donc, la PDF de InVT est nécessairement symétrique, i.e. le skewness de la PDF est nul. Nous observons un skewness faible mais non nul (figure 5.6b). Cela est dû à 2 raisons principales : nous avons une légère anisotropie aux grandes échelles, et notre convergence statistique n'est pas encore parfaite.

Nous pouvons conclure que :

- La présence des forçages ne modifie pas de manière qualitative les PDF de vitesse et les InV.
- Les similarités des InVT et celui des InVL sont un indicateur de l'isotropie.
- La forme des PDF calculées sont en accord avec les résultats classiques en



FIGURE 5.6: Comparaisons des skewness et flatness des InV transversale et longitudinale : (a)- skewness pour InV longitudinale, (b)- skewness pour InV transversale , (c)- flatness pour InV longitudinale, (d)- flatness pour InV transervsale

fluide Newtonien [50].

5.4.4 L'effet du nombre de Reynolds

Les arguments phénoménologiques indiquent que les effets du polymère sont significatifs aux petites échelles. Or, notre résolution spectrale est limitée, afin de résoudre correctement les petites échelles, nous ne pouvons simuler seulement que des écoulements à faible nombre de Reynolds. Nous allons dans un premier temps caractériser les influences du nombre de Reynolds sur les résultats statistiques pour un fluide Newtonien.

Nous faisons les mêmes analyses que celles présentées dans la section précédente : sur la figure 5.7, nous comparons la PDF de la vitesse pour un cas à grand Reynolds (cas a6, $Re_{\lambda} \approx 100$) et un cas à plus faible Reynolds (cas a1 $Re_{\lambda} \approx 30$).



FIGURE 5.7: Comparaison des PDFs des 3 composantes de vitesse suivant x,y,z pour les cas a1 (figure (a)) et a6 (figure (b))



FIGURE 5.8: Comparaison des PDFs de l'incrément de vitesse longitudinale entre le cas à faible Reynolds $Re_{\lambda} \simeq 30$ (figure (a)) et cas à haut Reynolds $Re_{\lambda} \simeq 100$ (figure (b))

Nous constatons qu'il existe une influence significative du Reynolds sur la PDF de la vitesse. Plus le nombre de Reynolds est important, plus la pdf tend vers une distribution Gaussienne.

Nous comparons également les PDF d'InVT et d'InVL pour ces 2 cas. Nous constatons que avec les Reynolds plus élevés, les caractéristiques de PDFs (skewness non nul pour InVT, flatness non nul pour InVT et InVL) sont plus nettes dans le cas du plus grand nombre de Reynolds. L'évolution des moments en fonction des échelles pour le cas à haut Reynolds est comparée avec celle des cas à plus petits Reynolds sur la figure 5.6.



FIGURE 5.9: Comparaison des PDFs de l'incrément de vitesse transversale entre le cas à faible Reynolds $Re_{\lambda} \simeq 30$ (figure (a)) et cas à haut Reynolds $Re_{\lambda} \simeq 100$ (figure (b)

5.5 Analyse statistique appliquée au fluide Non Newtonienne

Nous pouvons nous poser la question suivante : est-ce que la présence des polymères modifie de manière significative les statistiques du fluide porteur notamment les PDF et les fonctions de corrélation dans une turbulence ? Nous allons, dans un premier temps, vérifier si la présence de polymère affecte l'isotropie de notre système. Ensuite, nous allons calculer les PDF classiques pour le cas Non Newtonien et les comparer au cas Newtonien. Nous allons également pour les cas Non Newtoniens faire varier les paramètres principaux (ν_f , ν_p et τ_p) pour voir leurs effets.

5.5.1 Vérification de l'isotropie

A priori, les dynamiques macroscopiques des polymères sont isotropes, leur présence n'est pas une source d'anisotropie. Mais les polymères s'orientent suivant la direction de cisaillement et exercent une force dans cette direction, ils peuvent donc amplifier l'anisotropie existante au sein de notre système. Sur la figure 5.10, nous comparons notre critère d'anisotropie (cf. section 5.4.2) d'un cas Newtonien et d'un cas Non Newtonien. Nous observons qu'aux petites échelles, l'écoulement avec polymère reste toujours isotrope, mais la séparation des courbes (dégradation de l'isotropie) a lieu plus tôt. Malgré l'anisotropie observée à grandes échelles pour les 2 cas, il est encore raisonnable d'utiliser l'hypothèse d'isotropie pour l'analyse.

5.5.2 Comparaisons entre Newtonien et Non Newtonien

Dans ce paragraphe, nous allons comparer les PDFs d'un cas Newtonien (cas a1) et d'un cas Non Newtonien (cas a2), les PDFs des autres cas Non Newtoniens sont présentées en annexe.



FIGURE 5.10: Comparaison des 4 fonctions $\frac{r}{2} \frac{\partial f_y(r)}{\partial r}$ (blue line), $\frac{r}{2} \frac{\partial f_z(r)}{\partial r}$ (green line), $g_y(r)$ (red line) et $g_z(r)$ (cyan line) de cas Newtonien (a1)-figure a et cas Non Newtonien (a2)-figure b



FIGURE 5.11: Comparaison des PDFs des 3 composantes de vitesse suivant x,y,z pour le fluide Newtonienne (cas a1- figure (a)) et cas fluide non Newtonien (cas a2- figure (b))

La première grandeur statistique que nous pouvons regarder est la PDF de vitesse. Dans un fluide Newtonien, comme dans la partie précédente, nous observons une densité de probabilité (PDF) qui suit une loi de distribution Gaussienne, ce qui est prévu et en bon accord avec la littérature (voir section 5.4.3 et 5.4.4). Sur la figure 5.11 on compare les 3 composantes suivant les 3 directions Cartésiennes de la fluctuation de vitesse pour un cas Newtonien (figure 5.11 (a)) et un cas Non Newtonien (figure 5.11 (b)). Nous constatons que la présence des polymères n'a pas une influence significative sur la PDF de la vitesse : nous observons toujours une PDF qui ressemble à une distribution Gaussienne .

Nous examinons ensuite le PDF des InVT (Figure 5.12) b et InvL (Figure 5.13) b avec la présence des polymères. Nous n'observons pas de changements qualitatifs avec la présence des polymères pour le régime de concentration choisi. Afin de comparer de manière quantitative les PDFs, nous comparons l'évolution des moments



FIGURE 5.12: Comparaison des PDF des incrément transversaux de vitesse pour différentes valeurs de $\frac{r}{\eta}$ (a)-un cas Newtonien (cas a1) et (b)-un cas non Newtonien (cas a2)



FIGURE 5.13: Comparaison des PDF des incrément de la vitesse longitudinale pour différentes valeurs de $\frac{r}{\eta}$ (a)-un cas Newtonien (cas a1) et (b)-un cas non Newtonien (cas a2)

statistiques d'ordre 3 et 4 en fonction de l'échelle (figure 5.14). Nous observons une caractéristique intéressante avec les cas polymères : le skewness de l'InVT n'est pas nul, mais surtout il tend vers 0 de façon plus lente qu'en Newtonien.





FIGURE 5.14: Comparaisons de skewness et flatness des IV transversale et longitudinale : (a)- skewness pour IV longitudinale, (b)- skewness pour IV transversale , (c)- flatness pour IV longitudinale, (d)- flatness pour IV transervsale

Extension des polymères 5.6

-0.25

-0.30

-0.45

-0.50

Naturellement nous nous intéressons aux distributions de l'extension des polymères. Comme nous l'avons vu dans le chapitre III, l'hypothèse de la distribution Gaussienne de l'extension des polymères au niveau microscopique conduit à une force de rappel linéaire avec la déformation. A l'échelle macroscopique, si la force de rappel est toujours linéaire avec la déformation (la fonction de Peterlin $\mathcal{P}(C)$ vaut 1), intuitivement, nous nous attendons que la distribution de l'extension des polymères **R** suive une loi de distribution Gaussienne. Notre tenseur de conformation C est la corrélation d'ordre 2 de l'extension \mathbf{R} , sa trace est :

$$tr(\boldsymbol{C}) = C_{ii} = \langle R_i R_i \rangle = \left\langle |\mathbf{R}|^2 \right\rangle.$$
(5.24)



FIGURE 5.15: Comparaison entre PDF d'extension des polymères pour différentes cas

Donc C_{ii} doit suivre une loi du Chi-2 avec un degré de liberté car $\langle R_i R_j \rangle$ est une statistique en 1 point. La fonction Chi-2 est définie comme :

$$\chi_k(x) = \frac{1}{2^{\frac{k}{2}} \Gamma(k/2)} x^{\frac{k}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}}$$
(5.25)

où k est le nombre de degré de liberté (k = 1 dans notre cas), et Γ est une fonction définie comme :

$$\Gamma(x) = \lim_{n \to \infty} \frac{n! n^z}{\prod_{m=0}^n (z+m)}$$
(5.26)

Le figure 5.15 compare le PDF de C_{ii} avec la fonction Chi-2 $\chi_1(x)$. Nous pouvons voir que les comportements de nos cas suivent assez bien la loi $\chi_1(x)$, donc, le comportement du modèle FENE-P est consistant avec sa construction.

Nous observons que la distribution de l'extension des polymères s'éloigne du comportement Gaussien pour les grandes extensions.

5.7 Étirement global des polymères par le fluide

Nous pouvons écrire les équations qui décrivent l'évolution de l'énergie cinétique de la turbulence et de l'énergie élastique des polymères à partir des équations (5.1) et (5.3). L'évolution de l'énergie cinétique s'écrit :

$$\frac{1}{2}\partial_t \left\langle \|\mathbf{u}\|^2 \right\rangle = -\nu_f \left\langle \|\nabla \mathbf{u}\|^2 \right\rangle + \left\langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \right\rangle + \frac{\nu_p}{\tau_p} \left\langle \mathbf{u} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{C}) \right\rangle, \qquad (5.27)$$



FIGURE 5.16: Scénario de l'étirement local

et celle de l'énergie élastique s'écrit :

$$\partial_t \left\langle K_p tr(\boldsymbol{C}) \right\rangle = -\frac{K_p}{\tau_p} \left\langle tr(\boldsymbol{C}) - 3 \right\rangle + K_p \left\langle tr(\boldsymbol{C}.\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T.\boldsymbol{C}) \right\rangle$$
(5.28)

Dans une configuration homogène, nous pouvons montrer que les termes de couplage (le dernier terme dans chaque équation) des équations (5.27) et (5.28) sont égaux en valeur absolue mais de signe opposé. Nous pouvons les interpréter comme un échange d'énergie entre 2 équations.

L'écoulement porteur étire les polymères, donc injecte de l'énergie dans les polymères sous forme d'énergie élastique (potentielle). Quand les polymères sont orientés d'une certain manière, ils peuvent relaxer vers un état d'équilibre en réinjectant de l'énergie dans le fluide. Le bilan d'énergie est obtenu en combinant les 2 équations (5.1) et (5.3):

$$\partial_t \left\langle \|\mathbf{u}\|^2 / 2 + K_p tr(\mathbf{C}) \right\rangle = \left\langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \right\rangle - \nu_f \left\langle \|\nabla \mathbf{u}\|^2 \right\rangle - \frac{K_p}{\tau_p} \left\langle tr(\mathbf{C}) - 3 \right\rangle.$$
(5.29)

Dans un état stationnaire, nous avons un équilibre entre énergie injectée par le forçage et la dissipation composée de la dissipation visqueuse et de la dissipation par la relaxation des polymères. Nous allons étudier comment l'énergie est distribuée entre champ de vitesse et champ de conformation.

Intuitivement, nous pouvons imaginer que l'extension d'un polymère est un produit de la différence de vitesse δu aux 2 extrémités de la chaîne avec un temps τ pendant lequel ce polymère est étiré .

L'extension des polymères est due à deux actions principales : une force d'étirement qui est proportionnelle aux gradients de vitesse, et une force de relaxation qui est inversement proportionnelle au temps de relaxation des polymères. Comme la différence de vitesse aux extrémités de la chaîne ($\delta \mathbf{u}$) est directement liée au le gradient de vitesse ($\nabla \mathbf{u}$), nous supposons que le temps d'étirement des polymères (τ) est proportionnel avec le temps de relaxation des polymères (τ_p). Le scénario simplifié est décrit dans la figure 5.16. Nous définissons la direction parallèle $(\boldsymbol{x}_{\parallel})$ et la direction perpendiculaire (\boldsymbol{x}_{\perp}) par rapport aux cisaillements locaux. La différence de vitesse peut être estimée dans ce repère local par :

$$\delta u = R_0 \frac{\partial u}{\partial_\perp} \tag{5.30}$$

 R_{\perp} est la projection de **R** suivant la direction perpendiculaire. Le cisaillement local à une échelle $l_k = 1/k$ fixée est proportionnelle à $k^2 E_K(k)$, il atteint sa valeur maximale à l'échelle de Kolmogorov, et est estimé par :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial_{\perp}}\right)_{max} \sim \sqrt{\frac{\epsilon_f}{\nu_f}} \tag{5.31}$$

Comme les polymères sont très petits devant les échelles de la turbulence, nous supposons que leur dynamique dépend du gradient le plus fort. Nous obtenons une estimation de l'étirement suivant la direction de cisaillement :

$$R_{\parallel}(\tau_p) \approx R_{\perp}(0) \sqrt{\frac{\epsilon_f}{\nu_f}} \tau_p.$$
(5.32)

C'est juste une estimation de l'ordre de grandeur. Par dimensionnement, nous pouvons voir le produit $\sqrt{\frac{\epsilon_f}{\nu_f}} \tau_p$ comme le nombre de Weissenberg défini à l'échelle de Kolmogorov :

$$Wi_{\eta} = \sqrt{\frac{\epsilon_f}{\nu_f}} \tau_p \tag{5.33}$$

Si les polymères sont suffisamment étirés, ils sont quasiment alignés avec la direction du cisaillement : $(|\mathbf{R}| \approx R_{\parallel}) \gg (R_{\perp} \approx R_0)$. L'extension suivant la direction de cisaillement va donc déterminer la dynamique du tenseur de conformation et on a :

$$\langle C_{ii} \rangle \sim \frac{\left\langle R_{\parallel}^2 \right\rangle}{R_0^2} \sim \frac{\tau_p^2 \epsilon_f}{\nu_f} = (W i_\eta)^2.$$
 (5.34)

Cette estimation grossière est en accord avec nos données, comme illustré figure 5.17.

$$\langle C_{ii} \rangle = A \frac{\tau_p^2 \epsilon_f}{\nu_f} = A(W i_\eta)^2, \qquad (5.35)$$

Avec une régression linéaire nous pouvons estimer la valeur de la constante $A \simeq 3.3 \pm 0.2$.



FIGURE 5.17: Dépendance de l'étirement des polymères au nombre de Weissenberg

5.8 Influence des polymères sur la dissipation et la réduction de traînée

Un effet spectaculaire des polymères est l'effet de réduction de traînée : une faible quantité de polymère (quelque p.p.m.) mélangé dans un fluide Newtonien peut faire réduire la perte de charge lors d'un écoulement jusqu'à 80% [76, 81, 82].

Dans le cadre de ce travail, nous avons une géométrie homogène et isotrope où il n'existe pas de parois. Donc nous ne pouvons pas définir une perte de charge classique. Mais nous pouvons faire une analogie entre la perte de charge basée sur la dissipation visqueuse. Comme dans Perlekar et al. [55], nous pouvons définir une "réduction de traînée" par comparaison à la dissipation visqueuse :

$$DR = \frac{\epsilon_{Newtonien} - \epsilon_{NN}}{\epsilon_{NN}} \tag{5.36}$$

où $\epsilon_{Newtonien}$ est la dissipation visqueuse dans un cas Newtonien et ϵ_{NN} est la dissipation visqueuse dans un cas non-Newtonien de mêmes paramètres et condition que le cas Newtonien.

Perlekar et al. ont comparé la dissipation visqueuse dans le cas d'un forçage entre un fluide Newtonien et un fluide non-Newtonien [55] et observent une diminution considérable de la dissipation visqueuse avec la présence de polymères.

Nous reproduisons cet effet pour une turbulence en déclin, car nous pouvons retrouver les analogies entre la turbulence en déclin avec la turbulence au coeur d'un canal avec grille amont. Comme la turbulence est sensible aux conditions initiales, le travail de définir une bonne condition initiale est très important. Nous allons étudier l'influence des conditions initiales sur la réduction de traînée définie par l'équation (5.36).

Pour la condition initiale du fluide, nous pouvons choisir une turbulence déjà

développée (un état stationnaire du cas a2) ou un bruit aléatoire. Pour la condition initiale du polymère, il peut être déjà étiré ou au repos. Nous avons donc préparé 4 cas de turbulence en déclin avec les même paramètres mais avec différentes conditions initiales, et nous les comparons avec le cas forçage (a2) (l'origine du temps du cas forçage est quand le polymère commence à être injecté) :

- Cas a2-1 : Nous reprenons le champ de vitesse et le champ de conformation à un état stationnaire du cas a2 comme condition initiale.
- Cas a2-2 : Nous prenons la condition initiale du cas a2-1 mais avant le premier pas de temps, en ayant remis le champ de conformation égal à la matrice identité.
- Cas a3-1 : Le champ de conformation est pris d'un état stationnaire de cas a2. Le champ de vitesse est généré de manière aléatoire avec la distribution de l'énergie spectrale identique à celle des l'état stationnaire de a2.
- Cas a3-2 : Le champ de conformation est mis initialement égal à la matrice identité. Le champ de vitesse est généré de manière aléatoire avec la distribution de l'énergie spectrale identique à celle des l'état stationnaire de a2 (le champs de vitesse identique à cas a3-1).



FIGURE 5.18: L'évolution en temps de la réduction de traînée pour différentes conditions initiales

La figure 5.18 montre ainsi l'évolution de la réduction de traînée au cours du temps. Nous constatons que cette grandeur dépend fortement de la condition initiale du polymère et est peu sensible à la condition initiale du champ de vitesse. En effet, les cas a2-2 et a2-3 ont la même condition initiale pour le champ de conformation (les polymères sont initialement au repos), mais différentes conditions initiales du champ de vitesse. Nous constatons que l'évolution de la DR dans ces cas sont très similaires. Par contre, si nous comparons les cas a2-2 au cas a2-1 (les 2 cas ont le même champ de vitesse initiale), nous constatons que dans le cas a2-1, où les polymères sont initialement étirés, la réduction de traînée est plus importante.

Cela impose une contrainte en plus sur les expériences : afin de caractériser précisément la réduction de traînée, il faudrait connaître l'état des polymères. Suivant la façon d'introduire les polymères dans l'écoulement et la configuration de l'installation, nous pouvons avoir différents états d'étirement des polymères à l'entrée du canal.

5.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu les analyses classiques dans l'espace physique appliquées au fluide non-Newtonien qui est mis en comparaison avec un cas Newtonien. Les paramètres sont choisis tels qu'on puisse observer finement les interactions fluide-polymères aux petites échelles. Pour cette raison, dans notre cas, les effets des polymères ne se manifestent pas spectaculairement à travers les statistiques dans l'espace physique. Malgré ces limitations, nous pouvons constater que :

- Il existe une non-négligeable anisotropie aux petites échelles du fluide avec la présence des polymères. Nous spéculons pour l'instant que cette anisotropie vient du fait que les grandes structures (qui sont la seul source d'anisotropie dans notre système) étirent toutes les échelles (même les plus petites) des polymères et donnent une anisotropie. Les petites échelles du polymère, à son tour, réinjecte cette anisotropie aux petites échelles du fluide.
- On observe que l'effet des polymères est plus significatif quand ils sont étirés. Donc l'état initial des polymères doit être pris en compte dans les études.

Les statistiques sur le champ de conformation nous donnent les observations qui restent intuitives : les statistiques de l'étirement des polymères suivent une distribution Gaussienne, qui est consistant avec l'hypothèse de modèle microscopique. Un simple raisonnement de dimensionnement nous a permis de trouver une loi qui relie l'extension moyenne des polymère avec les variables de la turbulence.

Chapitre 6

Transfert d'énergie échelle par échelle

Sommaire

6.1	Intro	oduction			
6.2	Analyse échelle par échelle				
	6.2.1	Énergie spectrale pour le champ de vitesse			
	6.2.2	Décomposition en racine carrée du tenseur de conforma-			
		tion et énergie spectrale pour l'énergie élastique 133			
	6.2.3	Dimensionnement			
6.3	Bila	n de transfert d'énergie échelle par échelle 139			
	6.3.1	Equation de Lin 139			
	6.3.2	Transfert entre énergie cinétique et énergie élastique 141			
	6.3.3	Nouveaux mécanismes de cascade d'énergie 144			
6.4	Bila	n de transfert d'énergie mode par mode : interac-			
	tion	triadique			
	6.4.1	Transfert d'énergie cinétique par advection : cas Newtonien146			
	6.4.2	Transfert d'énergie cinétique par advection : cas non			
		Newtonien			
	6.4.3	Transfert d'énergie élastique par advection 152			
	6.4.4	Échange d'énergie entre turbulence et polymère 156			
	6.4.5	Transfert $T_a(k)$			
6.5	Con	clusion			

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons fait certaines analyses globales appliquées aux fluides Non Newtoniens et nous les avons comparées aux résultats classiques des fluides Newtoniens. Dans cette partie, nous nous intéressons aux transferts d'énergie entre les échelles, grâce aux analyses dans l'espace de Fourier.

Rappelons que d'après l'image classique de turbulence, l'énergie cinétique est transférée des grandes échelles aux petites grâce au terme de transfert non linéaire $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$. Ce transfert d'énergie est atténué aux petites échelles par les effets visqueux. L'échelle qui délimite la fin de cette cascade d'énergie est l'échelle de Kolmogorov. Les structures plus petites que l'échelle de Kolmogorov ne sont plus alimentées par la cascade d'énergie. Elles disparaissent rapidement, donc leur contribution énergétique est négligeable. En 2011, Perlekar [35, 55] a aussi montré l'activité du fluide porteur aux échelles plus petites que l'échelle de Kolmogorov.

Nous allons étudier plus en détail la zone spectrale autour de l'échelle de Kolmogorov en particulier avec la présence des polymères.

6.2 Analyse échelle par échelle

6.2.1 Énergie spectrale pour le champ de vitesse

La distribution d'énergie cinétique échelle par échelle peut être caractérisée par le spectre d'énergie cinétique, qui est défini au chapitre II, section 2.4.5. Sa formule est rappelée ici :

$$E_K(k) = \sum_{|\boldsymbol{k}|=k} \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}}$$
(6.1)

Sur la figure 6.1, on montre une comparaison entre le spectre d'énergie cinétique pour le cas d'un fluide Newtonien et celui d'un fluid non-Newtonien. Nous utilisons la normalisation classique par les variables de Kolmogorov pour superposer les spectres. On observe que pour notre jeu de paramètres, les polymères n'affectent pas qualitativement le spectre dans la zone inertielle (entre échelle intégrale et échelle de Kolmogorov), mais dans la zone dissipative (les échelles plus petites que l'échelle de Kolmogorov), il y a une zone en k^{-6} qui émerge.

Comme nous l'avons vu au chapitre V, nous avons effectué des simulations forcées avec 2 types de forçages différents, ainsi que des simulations en déclin avec différentes conditions initiales, nous avons également fait varier les 3 paramètres principaux s, ν , et τ_p pour confirmer la présence de ce comportement. Dans la plage de paramètres que nous avons exploré, cette loi de puissance dans la zone dissipative semble robuste. Nous notons que ce comportement a été observé par Perlekar dans le cas 2D [35] et 3D[55]. Dans ces simulations, Perlekar observe également une autre loi de puissance avec l'exposant $\alpha = 3.5$ pour les échelles qui sont encore plus petites. Cette loi de puissance, qui n'apparait pas dans notre simulation (probablement dû au manque de résolution spectrale), est probablement la signature de la turbulence élastique, qui est observée pour les nombres de Reynolds très petits[33, 34, 14]. Pour un nombre de Weissenberg grande échelle (Wi_L)



FIGURE 6.1: Comparaison du spectre d'énergie cinétique E_K normalisé (par les variables de Kolmogorov) entre les cas non Newtonien (trait continue) avec le cas Newtonien (trait pointillé rouge)

donné, si on se focalise sur les petites échelles, le nombre de Reynolds local décroit avec l'échelle, et nous pouvons atteindre une échelle où la turbulence élastique a lieu.

Il semble que la loi de puissance k^{-6} ne soit pas une signature de la turbulence élastique mais une zone intermédiaire où le ratio local Wi/Re est encore trop petit pour observer une instabilité élastique. En effet, nous allons montrer que cette loi de puissance correspond à une gamme d'échelles où nous observons une injection de l'énergie des polymères dans le fluide, qui est par la suite dissipée par effet visqueux.

Avec notre choix de paramètre, nous ne pouvons pas constater le blocage de la cascade d'énergie par les polymères, comme prévu par la théorie de la balance d'énergie de De Gennes et Tabor [72, 22, 21]. Dans notre cas, la seule modification apportée par les polymères est une loi de puissance dans la zone dissipative, qui démarre à une échelle plus petite que l'échelle de De Gennes, qui est de l'ordre de l'échelle de Kolmogorov dans notre simulation.

6.2.2 Décomposition en racine carrée du tenseur de conformation et énergie spectrale pour l'énergie élastique

Physiquement, la matrice C doit rester toujours définie positive par sa construction. Mais l'équation gouvernant sa dynamique ne contient aucun terme ou mécanisme qui empêche cette matrice de perdre son caractère défini positif. Au lieu de résoudre directement l'équation (5.3), Balci [3] a reformulé le modèle en considérant l'unique racine carrée symétrique de C. En effet, comme C est définie

positive, nous pouvons l'écrire comme une racine carrée d'une matrice symétrique unique (au signe près)

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{B} \tag{6.2}$$

Ce type de décomposition est appelé "square root formulation" (SRF). Au lieu de simuler directement l'évolution en temps de C, nous remplaçons l'équation (5.3) par une nouvelle équation (6.3) et simulons l'évolution de la matrice B:

$$\partial_t \boldsymbol{B} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B} \cdot \nabla \boldsymbol{u} + \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{1}{2\tau_p} (\mathcal{P}(\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{B})\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}^{-1}),$$
 (6.3)

avec une unique matrice A antisymétrique qui compense la partie non symétrique de $B \cdot \nabla \mathbf{u}$, pour que B reste symétrique. Le terme qui contient A disparaitra lors de la conversion de l'équation (6.3) en l'équation (5.3). Balci [3] a montré que la nouvelle équation (6.3) est équivalente à l'ancienne (5.3). L'avantage de simuler Bet de retrouver C grâce à l'équation 6.2 est : la matrice C, calculée par l'équation (6.2), est toujours définie positive. Un autre avantage d'utiliser le SRF est que, l'énergie élastique $e_p = K_p C_{ii}$ peut s'écrire sous forme quadratique $e_p = K_p B_{ij}^2$. C'est un concept avantageux qui permet d'utiliser un moment statistique d'ordre 2 pour décrire la distribution d'énergie aux différentes échelles.

En effet, nous considérons le tenseur des corrélations et son spectre, de manière analogue au champ de vitesse (voir chapitre II) : nous définissons le tenseur de corrélation du champ \boldsymbol{B} dans un turbulence homogène par :

$$\phi_{ijkl}^{p}(\mathbf{r}) = \langle B_{ij}(\boldsymbol{x}) B_{kl}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{r}) \rangle .$$
(6.4)

Sous l'hypothèse d'isotropie, nous définissons le spectre d'énergie élastique de manière similaire a l'équation (2.80):

$$\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')E_p^{\boldsymbol{k}} = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')K_p \int_{\mathbb{R}^3} \phi_{ijij}^p(\mathbf{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathbf{dr}^3 = K_p \left\langle \widehat{B}_{ij}(\boldsymbol{k})\overline{\widehat{B}_{ij}}(\boldsymbol{k}') \right\rangle, \quad (6.5)$$

avec \hat{B} qui est la transformée de Fourier de B. Par la suite, nous allons utiliser le spectre 1D :

$$E_p(k) = \int_{|\boldsymbol{k}|=k} E_p^{\boldsymbol{k}} \, \mathbf{dk}^2 \tag{6.6}$$

qui est défini tel que

$$\int_{0}^{\infty} E_{p}(k)dk = K_{p}\left\langle C_{ii}\right\rangle = e_{p}.$$
(6.7)

Cette définition est similaire à celle utilisée par De Angelis et al [15] : la différence est qu'ils utilisent une décomposition dans la base propre au lieu d'une décomposition symétrique dans notre cas.

Ces définitions s'adaptent bien au concept de la distribution d'énergie, échelle par échelle, qui nous est familière. En effet, comme l'énergie élastique peut s'écrire



FIGURE 6.2: Spectre d'énergie élastique (non normalisé) des polymères pour tous les cas

sous forme quadratique $e_p = K_p \langle \boldsymbol{B} : \boldsymbol{B} \rangle$, nous pouvons appliquer l'égalité de Parseval entre l'espace physique et l'espace de Fourier, en calculant l'énergie élastique moyenne sur notre domaine de calcul \mathcal{D} de volume $V_{\mathcal{D}}$:

$$e_{p} = \frac{K_{p}}{V_{\mathcal{D}}} \int_{\mathcal{D}} C_{ii}(\boldsymbol{x}) d\mathbf{x}^{3} = \frac{K_{p}}{V_{\mathcal{D}}} \int_{\mathcal{D}} B_{ij}(\boldsymbol{x}) B_{ij}(\boldsymbol{x}) d\mathbf{x}^{3}$$
$$= \frac{K_{p}}{V_{\mathcal{D}}} \int_{\mathbb{R}^{3}} \widehat{B}_{ij}(\boldsymbol{k}) \overline{\widehat{B}}_{ij}(\boldsymbol{k}) d\mathbf{k}^{3} \quad (6.8)$$

La distribution d'énergie élastique échelle par échelle peut donc être évaluée par le spectre d'énergie élastique (cf. ref. [19]) qui est défini dans l'équation (6.5) et (6.6)

Dans la figure 6.2, nous montrons les spectres d'énergie élastique de tous nos cas. Pour chaque cas, nous observons que ce spectre suit une même loi de puissance $E_p(k) \sim k^{-\gamma}$ avec $\gamma \approx 2$ pour presque tout notre plage de résolution spectrale. L'exposant de cette loi de puissance semble indépendant de la configuration (forcée ou déclin) ou de différents paramètres du système (ν_f, ν_p, τ_p).

Ce résultat est en accord avec les résultats présentés dans la référence [19], où l'auteur trouve également une loi de puissance avec un exposant d'environ -2. Malgré l'utilisation d'une décomposition différente de la matrice C (une décomposition dans la base propre [15] versus une décomposition symétrique dans ce travail), les 2 décompositions portent la même signification physique.

6.2.3 Dimensionnement

En utilisant les observations et les arguments du chapitre précédent, dans ce paragraphe, nous suggérons un dimensionnement en fonction des différentes paramètres. D'abord nous observons, pour le spectre de l'énergie élastique, la présence d'une seule échelle de longueur dans notre plage de résolution spectrale : c'est l'échelle intégrale. Cette échelle intégrale est définie par :

$$L_p = \int_{k=0}^{\infty} \frac{k^{-1} E_p(k)}{E_p(k)} dk$$
(6.9)

En effet, la loi de puissance est observée pour E_p entre l'échelle intégrale et les les plus petites échelles résolues. Nous proposons un dimensionnement pour E_p :

$$E_p(k,t) \sim e_p^F(t) L_p(kL_p)^{-2} + e_p^M(t)\delta(k)$$
 (6.10)

où $\delta(k)$ est la fonction de Dirac et L_p est l'échelle intégrale des polymères qui est définie par l'expression (6.9).

Les quantités $e_p^F(t)$ et $e_p^M(t)$ représentent respectivement les contributions des "fluctuations" et de la "moyenne" de l'énergie élastique des polymères $e_p(t)$:

$$e_p^F(t) = \int_{k>0}^{\infty} E_p(k,t) dk = K_p \left\langle B'_{ij} B'_{ij} \right\rangle$$
(6.11)

$$e_p^M(t) = E_p(0,t) = K_p \langle B_{ij} \rangle \langle B_{ij} \rangle$$
(6.12)

où $B'_{ij} = B_{ij} - \langle B_{ij} \rangle$. Nous nous rappelons que suivant la loi établie au chapitre V (figure 5.17) :

$$e_p(t) = \int_{0}^{\infty} E_p(k, t) dk = e_p^F(t) + e_p^M(t) = K_p \langle C_{ii} \rangle \approx A K_p(W i_\eta)^2, \qquad (6.13)$$

où A est un coefficient obtenu par une régression linéaire 5.7. En combinant les expressions (6.11), (6.12) et (6.13) nous trouvons le dimensionnement suivant :

$$E_p(k|k \neq 0) \approx \left(A(Wi_\eta)^2 - \langle B_{ij} \rangle^2 \right) K_p L_p(kL_p)^{-2}.$$
(6.14)

L'exposant -2 dans l'expression (6.14) est obtenu plutôt par observation que par les arguments phénoménologiques. Pour l'instant nous n'avons pas trouver d'argument convaincant de type Kolmogorov ou Batchelor pour expliquer la présence de cet exposant.

Nous trouvons également un dimensionnement pour la loi de puissance $E_K \sim k^{-6}$ qui apparait dans la zone dissipative du spectre d'énergie cinétique. Dans cette zone, le transfert non linéaire de l'énergie cinétique par l'advection est négligeable, nous attendons un équilibre entre l'injection d'énergie par les polymères et la dissipation par effet visqueux. Dans l'équation de Navier-Stokes, cet équilibre s'écrit :

$$-\nu_f \Delta \mathbf{u} \approx \frac{\nu_p}{\tau_p} \nabla \cdot (\mathcal{P}(\boldsymbol{C})\boldsymbol{C})$$
(6.15)

En négligeant la fonction de Peterlin (hypothèse de faible étirement), et en "Fourier-transformant" l'équation (6.15), nous obtenons :

$$\nu_f^2 k^4 \frac{E_K(k)}{4\pi k^2} \approx \left(\frac{\nu_p}{\tau_p}\right)^2 k_i k_j \Phi_{ij}^k, \qquad (6.16)$$

où Φ_{ij}^{k} est un tenseur de densité d'énergie spectrale défini tel que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \Phi_{ij}^{\boldsymbol{k}} d\boldsymbol{k} = \langle C_{im} C_{jm} \rangle , \qquad (6.17)$$

Avec l'hypothèse d'isotropie, $\langle C_{im}C_{jm}\rangle$ s'écrit comme suit :

$$\langle C_{im}C_{jm}\rangle = \frac{\delta_{ij}}{3} \langle C_{mn}C_{mn}\rangle.$$
 (6.18)

Dans un système de symétrie miroir, le tenseur $\Phi_{ij}^{\mathbf{k}}$ prend la forme suivante :

$$\Phi_{ij}^{k} = \frac{1}{4\pi k^2} \left(f_1(k) \frac{k_i k_j}{k^2} + f_2(k) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \right), \tag{6.19}$$

où $f_1(k)$ et $f_2(k)$ ne sont des fonctions que de la norme du vecteur d'onde k, et sont indépendants de son orientation.

Remarquons que la contribution de $f_2(k)$ s'annulera quand nous faisons la multiplication $k_i k_j \Phi_{ij}^{\mathbf{k}}$.

Nous supposons que $f_1(k)$ suit une loi de puissance de $k : f_1(k) \sim k^{-\alpha_1}$. En utilisant cette hypothèse, nous obtenons :

$$\Phi_{ij}(\boldsymbol{k}) \sim \frac{L_B \left\langle C_{mn} C_{mn} \right\rangle}{4\pi k^2} \left((kL_B)^{-\alpha_1} \frac{k_i k_j}{k^2} + f_2(k) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \right).$$
(6.20)

En combinant cette expression avec l'équation (6.16), on obtient :

$$E_K(k) \approx \left(\frac{\nu_p}{\nu_f \tau_p}\right)^2 L_p^3 \left\langle C_{mn} C_{mn} \right\rangle (kL_p)^{-\alpha_1 - 2}.$$
(6.21)

D'après les observations, l'exposant de la loi de puissance est environ -6, donc $\alpha_1 = 4$.

De façon similaire à (6.11) et (6.11), nous décomposons $\langle C_{mn}C_{mn}\rangle$ en séparant la partie moyenne et la partie fluctuante du tenseur **B** :

$$\langle C_{mn}C_{mn}\rangle = \langle B_{mi}B_{in}B_{mj}B_{jn}\rangle = \left\langle \left(\langle B_{mi}\rangle + B'_{mi}\right)\left(\langle B_{in}\rangle + B'_{in}\right)\left(\langle B_{mj}\rangle + B'_{mj}\right)\left(\langle B_{jn}\rangle + B'_{jn}\right)\right\rangle$$
(6.22)

En prenant l'hypothèse d'isotropie, l'équation (6.22) se simplifie et on obtient :

$$\langle C_{mn}C_{mn}\rangle = \frac{1}{K_p^2} \left((e_p^M)^2 + 6e_p^M e_p^F \right) + \left\langle B'_{mi}B'_{in}B'_{mj}B'_{jn} \right\rangle$$
(6.23)



FIGURE 6.3: Spectres normalisés : la normalisation est choisie telle que les spectres devraient se superposer si notre arguement sur le dimensionnement qui conduit à l'expression (6.14) et (6.25) est correct. Q_f est definie dans l'équation (6.26) et $Q_p = A (Wi_n)^2 - \langle B_{ij} \rangle^2$.

La corrélation du 4-ème ordre $\langle B'_{mi}B'_{in}B'_{mj}B'_{jn}\rangle$ ne peut pas être calculée directement, en imposant l'hypothèse que la fluctuation est Gaussienne, nous l'approximons par

$$\left\langle B'_{mi}B'_{in}B'_{mj}B'_{jn}\right\rangle \approx \frac{3}{K_p}(e_p^F)^2$$
(6.24)

En combinant le dimensionnement dans la relation (6.21) avec (6.23) et (6.24), nous obtenons :

$$E_K(k) \approx \left(\frac{L_p^3}{\nu_f^2}\right) \left((e_p^M)^2 + 6e_p^M e_p^F + 3(e_p^F)^2\right) (kL_p)^{-6} = \left(\frac{L_p^3}{\nu_f^2}\right) (Q_f) (kL_p)^{-6} \quad (6.25)$$

où $Q_f = (e_p^M)^2 + 6e_p^M e_p^F + 3(e_p^F)^2.$

Pour vérifier si notre argument décrit bien la dynamique de l'écoulement, nous remplaçons Q_f par notre prédiction :

$$Q_{f} = K_{p}^{2} \left(3 \left(A(Wi_{\eta})^{2} - \langle B_{ij} \rangle^{2} \right)^{2} + 6 \left\langle B_{ij} \right\rangle^{2} \left(A(Wi_{\eta})^{2} - \langle B_{ij} \rangle^{2} \right) + \left\langle B_{ij} \right\rangle^{4} \right)$$
(6.26)

Nous allons maintenant vérifier si le dimensionnement (6.14) et (6.25) prédit correctement les résultats.

Figure 6.3a et 6.3b, les spectres sont normalisés tels qu'ils devraient se superposer si nos arguments sont corrects. On observe que :

— la superposition des spectres d'énergie cinétique est en général acceptable. Nous notons que les spectres pour le cas a5 et b2 sont légèrement déviés dans la zone dissipative. Rappelons que les paramètres de cas a5 sont choisis tels que les polymères soient fortement étirés par rapport aux autres cas. L'approximation de "faible étirement" produit une erreur de l'ordre de 25%. Le cas b2 correspond au cas avec une injection d'hélicité (corrélation entre la vorticité et la vitesse). Or nous avons négligé l'effet de l'hélicité dans l'expression (6.19) en prenant l'hypothèse d'isotropie avec la symétrie miroir. Un raisonnement plus raffiné est donc nécessaire pour prendre en compte l'hélicité.

— les spectres d'énergie élastique se superposent bien pour tout les cas.

6.3 Bilan de transfert d'énergie échelle par échelle

6.3.1 Equation de Lin

Dans cette partie nous allons écrire l'équation de Lin, qui permet de décrire l'évolution du spectre d'énergie cinétique et élastique. Sa forme classique (sans l'éffet des polymères) dans une turbulence homogène s'écrit [41] :

$$\partial_t E_K(k) = T_f(k) - 2\nu_f k^2 E(k) + F(k).$$
(6.27)

Dans cette équation, nous avons :

- $T_f(k)$ est le terme de transfert non linéaire, qui est responsable du transfert d'énergie entre les échelles.
- $2\nu_f k^2 E(k) = D_f(k)$ est le spectre de la dissipation visqueuse, son intégrale donne la dissipation totale.
- F(k) est le spectre du forçage. Quand ce terme injecte une quantité d'énergie suffisante et constante en temps, l'écoulement tendra vers un état statistiquement stationnaire et la dérivation en temps $\partial_t E_K(k)$ tendra vers zéro.

L'équation de Lin fut obtenue par Casiola et al [19] en utilisant une décomposition dans la base propre. Ici nous utilisons la décomposition symétrique, mais les procédures pour obtenir l'équation de Lin sont similaires. Premièrement, nous écrivons les équations (5.1) et (6.3) dans l'espace de Fourier pour chaque vecteur d'onde \mathbf{k} sous l'hypothèse de faible étirement $\mathcal{P} \approx 1$ (Mais la fonction de Peterlin peut être prise en compte si c'est nécessaire) :

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} = -\mathbf{P}_c^{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{w} \wedge \mathbf{u}}\right)^{\boldsymbol{k}} - \nu_f \boldsymbol{k}^2 \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} + \frac{\nu_p}{\tau_p} \mathbf{P}_c^{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{B})}^{\boldsymbol{k}}\right) + \widehat{\boldsymbol{f}}^{\boldsymbol{k}} \qquad (6.28)$$

$$\partial_t \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} = -\widehat{\mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} + \widehat{\boldsymbol{B} \cdot \nabla \mathbf{u}}^{\boldsymbol{k}} + \widehat{\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2\tau_p} \left(\widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} - \widehat{\boldsymbol{B}}^{-1}^{\boldsymbol{k}} \right) \qquad (6.29)$$

où $\hat{*}$ est la transformée de Fourier et \mathbf{P}_{c}^{k} est le projecteur de Craya $(P_{c})_{ij}^{k} = \delta_{ij} - k_i k_j / k^2$ qui enlève la partie potentielle du champ de vitesse.

Pour obtenir l'équation de Lin pour l'énergie cinétique, nous multiplions les 2 côtés de l'équation (6.28) avec le complexe conjugué de \hat{u} . Nous sommons le résultat obtenu avec le produit du complexe conjugué de l'équation (6.28) et \hat{u} .

Pour obtenir l'équation de Lin pour l'énergie élastique, nous procédons de façon similaire aux les étapes précédents : nous multiplions (avec le produit double contraction ":") les 2 côtés de l'équation (6.29) avec le complexe conjugué de \widehat{B} . Nous sommons le résultat obtenu avec le produit du complexe conjugué de l'équation (6.29) et **B**.

Nous obtenons donc les équations d'évolution pour les spectres d'énergie cinétique et d'énergie élastique¹ :

$$\partial_t E_K^{\boldsymbol{k}} = T_f^{\boldsymbol{k}} - D_f^{\boldsymbol{k}} + T_{p \to f}^{\boldsymbol{k}} + F^{\boldsymbol{k}}$$
(6.30)

$$\partial_t E_p^{\mathbf{k}} = T_p^{\mathbf{k}} - R_p^{\mathbf{k}} + T_{f \to p}^{\mathbf{k}} + T_a^{\mathbf{k}} + D_a^{\mathbf{k}}$$
(6.31)

Les termes suivants apparaissent dans les équations :

• Le terme de transfert de l'énergie cinétique :

$$T_f^{\mathbf{k}} = -\Re\left(\widehat{\mathbf{u}}^{\mathbf{k}} \cdot \left(\widehat{\mathbf{w} \wedge \mathbf{u}}\right)^{\mathbf{k}}\right)$$
(6.32)

où $\Re(*)$ est la partie réelle de * . Nous notons que le projecteur $\mathbf{P}_c^{\boldsymbol{k}}$ disparaît car nous avons le produit $\mathbf{P}_{c}^{k} \cdot \overline{\widehat{u}}^{k}$ • La dissipation par effet visqueux :

$$D_f^{\mathbf{k}} = 2\nu k^2 E_K^{\mathbf{k}} \tag{6.33}$$

• L'échange d'énergie des polymères vers le fluide :

$$S_{p \to f}^{\mathbf{k}} = \frac{\nu_p}{\tau_p} \Re \left(\left(\widehat{\nabla \cdot (\mathcal{P} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B})} \right)^{\mathbf{k}} \cdot \overline{\widehat{\boldsymbol{u}}}^{\mathbf{k}} \right)$$
(6.34)

• L'injection de l'énergie par forçage :

$$F^{\boldsymbol{k}} = \Re \left(\widehat{\boldsymbol{f}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \overline{\widehat{\boldsymbol{u}}}^{\boldsymbol{k}} \right)$$
(6.35)

• Le terme de transfert de l'énergie élastique (par advection) :

$$T_p^{\mathbf{k}} = 2K_p \Re\left(\left(\widehat{\mathbf{u}\nabla B}\right)^{\mathbf{k}} : \overline{\widehat{B}}^{\mathbf{k}}\right)$$
(6.36)

• La dissipation par la diffusion artificielle des polymères (voir chapitre IV ??):

$$D_a^k = -\nu_a \boldsymbol{k}^2 E_p^{\boldsymbol{k}} \tag{6.37}$$

• L'échange d'énergie du fluide vers le polymère (étirement des polymères par le fluide) :

$$T_{f \to p}^{\mathbf{k}} = 2K_p \Re\left(\left(\widehat{\mathbf{B}\nabla \mathbf{u}}\right)^{\mathbf{k}} : \overline{\widehat{\mathbf{B}}}^{\mathbf{k}}\right)$$
(6.38)

^{1.} Pour une raison de clarté de l'écriture, la dépendance en temps et l'indication (3D) est omise, la dépendance en nombre d'onde pour les spectres 3D est notée avec un exposant : par exemple le spectre 3D $E_K^{(3D)}(\mathbf{k},t)$ est noté $E_K^{\mathbf{k}}$, or le spectre 1D est noté $E_K(k)$

• Le terme pour compenser la partie antisymétrique du terme d'étirement :

$$T_{a}^{\boldsymbol{k}} = 2K_{p} \Re\left(\left(\widehat{\boldsymbol{A}}\widehat{\boldsymbol{B}}\right)^{\boldsymbol{k}} : \overline{\widehat{\boldsymbol{B}}}^{\boldsymbol{k}}\right)$$
(6.39)

• La dissipation par l'effet de la relaxation des polymères :

$$R_{p}^{\boldsymbol{k}} = \frac{K_{p}}{\tau_{p}} \left\{ 2\left(\widehat{\mathcal{P}}.\widehat{\boldsymbol{B}}\right)^{\boldsymbol{k}} : \overline{\widehat{\boldsymbol{B}}}^{\boldsymbol{k}} - \Re\left(\left(\widehat{\boldsymbol{B}}^{-1}\right)^{\boldsymbol{k}} : \overline{\widehat{\boldsymbol{B}}}^{\boldsymbol{k}}\right) \right\}$$
(6.40)

L'équation obtenue décrit l'évolution du spectre 3D, afin d'obtenir le spectre 1D. Pour chaque terme nous prenons la somme de tous les modes sur les coquilles sphériques S_k , par exemple pour l'énergie cinétique on a :

$$E_K(k) = \int_{\boldsymbol{k} \in S_k} E_K^{\boldsymbol{k}} d\mathbf{k}^2$$
(6.41)

La version discrète s'écrit :

$$E_K(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} E_K^{\boldsymbol{k}}$$
(6.42)

avec $S_k = \{ \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 | k - 0.5 < |\mathbf{k}| < k + 0.5 \}$

Nous obtenons :

$$\partial_t E_K(k) = T_f(k) - D_f(k) + S_{p \to f}(k) + F(k)$$
 (6.43)

$$\partial_t E_p(k) = T_p(k) - R_p(k) + S_{f \to p}(k) + T_a(k) + D_a(k)$$
(6.44)

Nous allons discuter des différentes contributions dans ces équations.

D'abord, pour l'équation d'évolution de $E_K(k)$ (6.43), un seul nouveau terme apparaît en comparant avec un écoulement Newtonien (6.27). Ce terme est $S_{p\to f}(k)$ qui représente le transfert d'énergie du fluide vers le polymère.

6.3.2 Transfert entre énergie cinétique et énergie élastique

Nous allons considérer l'écoulement avec un forçage qui a déjà atteint un état stationnaire (cas a_2) : la variation temporelle est négligée. Figure 6.4, nous considérons les différentes contributions à l'évolution du spectre d'énergie cinétique pour le cas a_2 .

On observe que, comme dans la turbulence sans polymère, l'injection de l'énergie dans le système, à grandes échelles, est redistribuée vers les petites échelles grâce au terme de transfert non linéaire : $F \simeq T_f$. La dissipation se présente vers les plus grandes échelles jusqu'aux plus petites. A chaque échelle (sauf les échelles d'injections), elle dissipe l'énergie fournie par le transfert non linéaire : $D_f \simeq T_f$. Comme notre nombre de Reynolds est limité, nous n'observons pas une séparation nette entre l'échelle d'injection et l'échelle dissipative (échelle de Kolmogorov). Une caractéristique originale de notre écoulement avec polymères est que la contrainte


FIGURE 6.4: Bilan de : (a) énergie cinétique $E_K(k)$, (b) flux de l'énergie cinétique, (c) énergie élastique et (d) flux de l'énergie élastique en fonction de $k\eta$. Les graphiques (a) et (c) sont présentés avec l'échelle log-log : les valeurs négatives sont présenté par des traits pointillés, et les valeurs positives sont présentées par des traits continus. Les graphiques (b) et (d) sont présentés avec l'échelle linéaire-log. Les échelles sont présentées par des traits verticaux : k_{L_K} est échelle integrale du fluide, et k_{DG} est l'échelle de De Genne.

induite par les polymères $S_{p\to f}$ enlève de l'énergie aux grandes échelles : $k \leq 30$. Pour les nombres d'onde plus grands (plus petites échelles), ce terme change le signe et donc injecte de l'énergie au fluide.

Une investigation récente de la turbulence isotrope visco-élastique [80] montre un mécanisme similaire pour les nombres de Reynolds et Weissenberg plus importants.

Pour les échelles k > 40, l'injection d'énergie par le polymère devient dominante par rapport à l'injection d'énergie par le transfert non linéaire, et elle équilibre la dissipation. A cette échelle, l'équation (6.16) devient valable, et nous commençons à observer l'émergence de la loi de puissance $E_K(k) \sim k^{-6}$.

Sur la figure 6.4c, les différents termes dans l'équation d'évolution de $E_p(k)$ sont étudiés. La première observation est que les deux derniers termes sur le côté droit de l'équation (6.44) $D_a(k), T_a(k)$ sont petits. Ces termes ont une origine numérique, ils seront négligés dans les discussions sur la physique de l'écoulement car ils sont petits par rapport aux autres.

Le deux termes dominants sont le terme d'étirement des polymères $S_{f\to p}(k)$, qui joue le rôle de la source d'énergie de ce bilan d'énergie, et le terme de relaxation R(k,t), qui est presque parfaitement en équilibre avec l'injections d'énergie : $R \sim S_{f\to p}(k)$. Cet équilibre conduit à la loi de puissance $E_p(k) \sim k^{-2}$. La valeur du transfert d'énergie élastique $T_p(k)$, représentant la redistribution d'énergie élastique par l'advection, est petit par rapport à ces 2 derniers termes.

Sur la figure 6.4(b) and (d), les différences termes sont intégrés du nombre d'onde 0 à k. Nous notons par exemple :

$$\Pi^{T}(k) = \int_{0}^{k} T(k')dk'.$$
(6.45)

et les même conventions sont utilisées pour les autres termes. Cette définition est intéressante si nous l'appliquons aux termes de transfert : pour une échelle kdonnée, $\Pi^T(k)$ mesure directement le flux d'énergie totale transférée des nombres d'ondes $\kappa \leq k$ aux nombres d'ondes $\kappa > k$.

En effet, nous pouvons vérifier la conservation d'énergie directement à partir des figures (6.4b) and (6.4d):

Le terme de production est défini par : (Production) = $\Pi^F(k_{max})$, et l'échange d'énergie entre le fluide et les polymères est défini par (Exchange) = $-\Pi^{S_{p\to f}}(k_{max}) = \Pi^{S_{f\to p}}(k_{max})$ (voir l'annexe (7.12) ou Casiola et al.[15])

Notre convention implique que si (Exchange) > 0 : le fluide globalement donne l'énergie aux polymères. Nous avons le bilan pour l'énergie cinétique : (Production) = $\epsilon_f - (\text{Exchange})$. On observe également le flux dominant qui est le transfert d'énergie cinétique par convection Π^{T_f} avec une valeur maximale d'environ 70% du flux injecté par le terme de forçage.

A partir de la figure (6.4d), nous observons un équilibre dans le bilan d'énergie des polymères (si nous négligeons la diffusion artificielle). Un flux d'environ 10% de l'énergie injectée dans le champs des polymères est observé, il correspond au transfert d'énergie élastique par advection Π^{T_p} : le transfert d'énergie élastique par advection est petit par rapport au mécanisme d'étirement -relaxation. Sur la figure 6.5 (a) and (b), nous avons présenté l'énergie totale $E_T = E_p + E_K$, l'énergie cinétique E_K , l'énergie élastique E_p , et leur ratio E_K/E_p . Nous présentons également l'échelle de De Gennes k_{DG} où $E_p(k_{DG}) = E_k(k_{DG})$. Pour les grandes échelles $E_K \ll E_p$, nous avons alors que pour les plus petites échelles $E_K \gg$ E_p . Dans notre cas, dans la zone dissipative, et après l'échelle de De Gennes, l'énergie cinétique n'est pas immédiatement modifiée comme dans la prédiction de "la théorie d'équilibre d'énergie" de De Gennes et Tabor [72, 22, 21], mais cet effet se met en place aux échelles encore plus petites, quand le transfert de l'effet de couplage $S_{p\to f}$ devient plus important que le transfert par convection T_f . Ce mécanisme basé sur la comparaison des transferts est en accord avec l'observation dans une expérience récente d'un écoulement avec polymère à grand nombre de Reynolds, où l'auteur a utilisé une "équilibre des flux d'énergie" pour expliquer le résultat [90].

Une caractéristique intéressante apparaît si nous considérons le bilan d'énergie totale. En effet, dans ce cas l'effet de couplage, entre fluide et polymères, peut être vu comme un troisième transfert d'énergie. Cela sera montré dans la section suivante.

6.3.3 Nouveaux mécanismes de cascade d'énergie

Nous considérons le même cas (a2) que la section précédente, mais au lieu de considérer l'énergie élastique et l'énergie cinétique séparément, nous considérons la somme des deux types d'énergie. L'énergie totale moyenne doit satisfaire l'équation bilan (5.29), que nous rappelons ici :

$$\partial_t \left\langle \|\mathbf{u}\|^2 / 2 + K_p tr(\mathbf{C}) \right\rangle = \left\langle \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \right\rangle - \nu_f \left\langle \|\nabla \mathbf{u}\|^2 \right\rangle - \frac{K_p}{\tau_p} \left\langle tr(\mathbf{C}) - 3 \right\rangle.$$
(6.46)

Considérons la somme de l'équation (6.43) et de l'équation (6.44), nous avons alors :

$$\partial_t E_T(k) = F(k) - D_T(k) + T_f(k) + T_p(k) + T_S(k), \qquad (6.47)$$

où nous définissons le spectre d'énergie totale $E_T(k) = E_K(k) + E_p(k)$ et nous avons négligé la contribution de la dissipation artificielle $D_a(k)$ et le terme de symétrisation $T_a(k)$. Dans cette équation, nous définissons la dissipation totale comme

$$D_T(k) = 2\nu_f k^2 E_K(k) - R_p(k), \qquad (6.48)$$

qui est la somme de la dissipation visqueuse et de la dissipation par l'effet de la relaxation des polymères.

Les termes de transfert $T_f(k)$, $T_p(k)$ et le terme de forçage F(k) sont déjà présents dans les équations d'évolution de E_K et E_p . Un nouveau terme de transfert $T_S(k)$, est alors défini par :

$$T_S(k) = S_{p \to f}(k) + S_{f \to p}(k).$$
 (6.49)

Son intégrale sur tous les nombres d'onde est nulle car ce terme représente l'échange d'énergie entre le champ de vitesse et le champ des polymères. Par contre, les



FIGURE 6.5: (a)Composition de l'énergie totale $E_T = E_K + E_p$ (b) le ratio $\frac{E_K}{E_p}$ (c) les termes de transfert d'énergie $E_T(k,t)$ (d) le flux de l'energie totale.

contributions de $S_{p\to f}(k)$ et $S_{f\to p}(k)$ ne s'annulent pas directement échelle par échelle. Dans la section suivante nous allons étudier encore plus en détail ce transfert d'énergie pour localiser le transfert d'énergie et identifier les interactions mode par mode.

L'évolution de l'énergie totale en fonction des échelles est présentée sur la figure 6.5 (a) et démontre 2 régimes :

- Le premier régime est celui où les échelles sont plus grandes que l'échelle de Kolmogorov $(k\eta < 1)$. Dans cette zone, le système est dominé par l'énergie cinétique. Sur la figure 6.5 (c), nous montrons différents termes (présents dans les équations (6.43), (6.44)). A grande échelle, nous pouvons voir que la dissipation totale est en équilibre avec le terme de convection de l'énergie cinétique $T_f(k) \approx D_f(k) + R_p(k)$. C'est un comportement similaire au cas de l'écoulement Newtonien. Par ailleurs, l'interaction entre polymère et fluide peut prendre une petite partie d'énergie ($T_S(k) < 0$ pour $k\eta < 0.5$) pour la donner aux plus petites échelles($T_S(k) > 0$ pour $k\eta > 0.5$).
- Le deuxième régime $(k\eta > 1)$ est dominé par l'énergie des polymères. A des échelles telles que $k\eta \approx 2$, l'effet du couplage polymères-fluide domine le transfert par la convection $(T_f(k) \ll T_S(k))$. Nous avons un nou-

veau équilibre entre le transfert par l'effet de couplage avec la dissipation $T_S(k) \approx D_f(k) + R_p(k)$. Ce mécanisme est un nouveau type de transfert d'énergie des grandes échelles vers les plus petites en comparaisons au cas Newtonien. L'advection des polymères $T_p(k)$ est négligeable en comparant avec les autres termes.

Figure 6.5 (d), le bilan des flux montre que toute l'énergie injectée est dissipée par effet visqueux et par effet de la relaxation : (Production) $\simeq \epsilon_f + \epsilon_p$.

6.4 Bilan de transfert d'énergie mode par mode : interaction triadique

Comme nous l'avons vu à la section précédente, l'énergie est transférée entre différentes échelles grâce aux 3 mécanismes de transferts : advection de l'énergie cinétique, effet de couplage entre la turbulence et les polymères, et advection de l'énergie élastique. Nous avons pu démontrer dans l'espace de Fourier que ces termes de transferts globalement conservent de l'énergie. Dans ce chapitre, nous allons étudier plus en détail ces transferts grâce à l'étude des interactions triadiques qui permettent de détailler les transferts entre petites et grandes échelles, entre fluide et polymères.

6.4.1 Transfert d'énergie cinétique par advection : cas Newtonien

6.4.1.1 Concept de diagramme KPQ

Pour établir les interaction triadiques, nous développons l'équation de Lin (6.43), mais uniquement pour le cas Newtonien dans un premier temps afin de simplifier l'explication. On part de (6.32) et de (6.43) dans laquelle $(S_{p\to f} = 0)$ pour le cas Newtonien donc :

$$\frac{\partial}{\partial t}E_K(k) = T_f(k) - D_f(k) + F(k)$$
(6.50)

où on décompose le produit non linéaire dans $T_f(k)$ grâce au produit de convolution, soit :

$$T_f(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} \Re\left(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{w} \wedge \boldsymbol{u}}\right)^{\boldsymbol{k}}\right) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_k} \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^3, \boldsymbol{q} \in \mathbb{Z}^3\\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}}} \Re\left(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{q}}\right)\right)$$

on utilise $\overline{\hat{u}}^{k} = \hat{u}^{-k}$ et un changement de variable $k \to -k$ pour passer de p + q = k à p + q + k = 0 et donc :

$$T_{f}(k) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_{k}} \sum_{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^{3}, \boldsymbol{q} \in \mathbb{Z}^{3} \atop \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}} \Re \left(\widehat{\boldsymbol{u}}^{-\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \right) \right) = \sum_{\boldsymbol{k} \in S_{k}} \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^{3}, \boldsymbol{q} \in \mathbb{Z}^{3} \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} \Re \left(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \cdot \left(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \right) \right)$$



FIGURE 6.6: Illustration du regroupement des triades (explication voir texte)

Sur la figure on illustre le regroupement de la somme des triades $\sum_{k \in S_k} \sum_{\substack{p,q \\ p+q+k=0}}$ qui permet d'avoir l'égalité à $\sum_{\boldsymbol{k}\in S_k}\sum_{\substack{\boldsymbol{p}\in\mathbb{Z}^3,\boldsymbol{q}\in\mathbb{Z}^3\\ \boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}}} = \sum_{\substack{0\geq p,q\geq N\\ \boldsymbol{p}\in S_p,\boldsymbol{q}\in S_q,\boldsymbol{k}\in S_k\\ \boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}=0}} \sum_{\boldsymbol{k}\in S_p,\boldsymbol{k}\in S_k}$. En effet on

a:

- 1. Sur la figure 6.6 a, on a dessiné une triade quelconque $(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) \in S_k \times \mathbb{Z}^3 \times \mathbb{Z}^3$ qui satisfait $\boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0$.
- 2. Sur la figure 6.6 b : On décompose l'ensemble qui contient des valeurs de p, qui est \mathbb{Z}^3 , en union des coquilles sphériques S_p soit $\mathbb{Z}^3 = \bigcup_{p \ge 0} S_p$.

D'autre part, à \boldsymbol{k} fixé, pour chaque $\boldsymbol{p} \in S_p$, alors, pour satisfaire $\boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} =$ 0, on a nécessairement \boldsymbol{q} appartient à l'ensemble

 $D_p(\mathbf{k}) = \{\mathbf{k} \text{ fixé }, \mathbf{p} \in S_p, \mathbf{q} \in \mathbb{Z}^3 \text{ tel que } \mathbf{p} + \mathbf{q} + \mathbf{k} = 0\}$ qui est une coquille sphérique centrée sur k et de rayon p (dessinée sur la figure 6.6 b).

On peut alors écrire :
$$\sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in \mathbb{Z}^3, \boldsymbol{q} \in \mathbb{Z}^3 \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} = \sum_{p \ge 0} \left(\sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_p \\ \boldsymbol{q} \in D_p(\boldsymbol{k})}} \right)$$

3. Sur la figure 6.6 c : on décompose l'ensemble qui contient des valeurs de q, qui est \mathbb{Z}^3 , en union des coquilles sphériques S_q ($\mathbb{Z}^3 = \bigcup_{q \ge 0} S_q$). Or, toujours à \boldsymbol{k} fixé, on a $q \in D_p(k)$, donc :

$$D_{p}(\boldsymbol{k}) = \left\{ \boldsymbol{k} \text{ fixé }, \boldsymbol{p} \in S_{p}, \boldsymbol{q} \in \bigcup_{q \ge 0} S_{q} \text{ tel que } \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0 \right\}$$
$$= \bigcup_{q \ge 0} \left\{ \boldsymbol{k} \text{ fixé }, \boldsymbol{p} \in S_{p}, \boldsymbol{q} \in S_{q} \text{ tel que } \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0 \right\}$$
On peut alors écrire :
$$\sum_{p \ge 0} \left(\sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_{p} \\ \boldsymbol{q} \in D_{p}(\boldsymbol{k})} \right) = \sum_{p \ge 0} \sum_{q \ge 0} \left(\sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_{p}, \boldsymbol{q} \in S_{q} \\ \boldsymbol{k} + \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} = 0} \right)$$

4. Sur la figure 6.6 d : on prendre k dans la coquille sphérique S_k , on a finalement :

$$\sum_{\boldsymbol{k}\in S_{k}}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}\atop\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}=0}=\sum_{\boldsymbol{k}\in S_{k}}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}\atop\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}=0}=\sum_{0\geq p,q\geq N}\sum_{\substack{\boldsymbol{p}\in S_{p},\boldsymbol{q}\in S_{q},\boldsymbol{k}\in S_{k}\\\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{k}=0}}$$
(6.51)

On peut donc réécrire le terme de transfert $T_f(k)$ sous la forme

$$T_{f}(k) = \sum_{\substack{0 \ge p, q \ge N \\ \boldsymbol{p} \in S_{p}, \boldsymbol{q} \in S_{q}, \boldsymbol{k} \in S_{k} \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} \Re \left(t_{f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \right)$$
$$= \sum_{\substack{0 \ge p, q \ge N \\ 0 \ge p, q \ge N}} t_{f}(k, p, q)$$
(6.52)

avec :

$$t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = (\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$$
(6.53)

$$t_f(k, p, q) = \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_p, \boldsymbol{q} \in S_q, \boldsymbol{k} \in S_k \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} - \Re \left(t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \right)$$
(6.54)

Il est difficile de visualiser $t_f^{(3D)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q})$ pour une triade car il faudrait une représentation de 9 dimensions. Avec le regroupement isotrope des triades dans la somme (6.52), le terme $t_f(k, p, q)$ se réduit à seulement 3 dimensions en $k = |\mathbf{k}|$, $p = |\mathbf{p}|$ et $q = |\mathbf{q}|$, et nous pouvons utiliser seulement 3 dimensions pour l'exprimer ce qui introduit le diagramme KPQ figure 6.7 à gauche. Sur la figure 6.7 à droite, pour une échelle k fixée, le diagramme KPQ représente le transfert d'énergie de toutes les interactions triadiques de l'échelle p avec l'échelle q.

L'ensemble décrit le rectangle d'interaction. On a dessiné quelque exemple d'interaction qui permet de se faire une idée du type d'interaction. Le diagramme est limité par 3 bandes qui satisfont les inégalités de triangle [41] :

$$|k - q|$$

$$|k - p| < q < k + p \tag{6.56}$$

$$|p - q| < k < p + q \tag{6.57}$$



FIGURE 6.7: Diagramme d'interaction KPQ à gauche et coupe à droite avec des illustrations des types de triades possibles pour chaque échelle p et q dans le rectangle d'interaction

En pratique, il est possible de calculer $t_f(k, p, q)$ en effectuant différents filtrages dans l'espace de Fourier :

- 1. A partir de \hat{w} , on filtre tous les modes qui n'appartiennent pas à la coquille sphérique S_q et on revient dans l'espace physique pour obtenir le champ filtré w^q
- 2. A partir de \hat{u} , on filtre tous les modes qui n'appartiennent pas à la coquille sphérique S_p et on revient dans l'espace physique pour obtenir le champ filtré \mathbf{u}^p
- 3. on calcule le produit $w^q \wedge \mathbf{u}^p$ dans l'espace physique et on transforme le résultat dans l'espace de Fourier $\widehat{w^q \wedge \mathbf{u}^p}$
- 4. on multiplie dans l'espace de Fourier $\widehat{wq} \wedge \widehat{up}$ par \widehat{u} et en sommant les différents modes appartenant à la coquille sphérique S_k , on obtient le résultat final $t_f(k, p, q)$

Le détail du transfert est obtenu et ressemble au travail mené en DNS de turbulence en rotation par Minini et al. [47]. Néanmoins, notre équation de Lin détaillée est plus complète dans l'espace de Fourier car elle permet d'avoir exactement pour une échelle k, l'interaction d'une échelle p avec une échelle q, alors que dans le travail de Minini et al. [47], on ne connaît pour une échelle k, que l'interaction d'une échelle p avec toutes les échelles q.

6.4.1.2 Propriété du terme $t_f(k, p, q)$

• Propriété 1 : A partir de la définition de $t_f^{(3D)}$ (équation 6.53), nous pouvons voir une première symétrie qui provient de la propriété du produit

vectorielle :

$$t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = (\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} = -(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}} \wedge \widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} = -t_f^{(3D)}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}) \quad (6.58)$$

A partir de cette symétrie, nous pouvons démontrer une relation entre les triades t_f :

$$t_f(k, p, q) + t_f(q, k, p) + t_f(p, q, k) + t_f(k, q, p) + t_f(p, k, q) + t_f(q, p, k) = 0$$
(6.59)

Par conséquent la somme sur toute les triades est nulle (c'est bien un transfert) :

$$\sum_{k,p,q} t_f(k,p,q) = 0$$
(6.60)

Les diagrammes tracés doivent satisfaire les symétries établies analytiquement, donc nous pouvons tester la relation (6.59) en calculant le maximum en valeur absolue de tous les k,p,q présents dans notre simulation. Ce maximum doit être égal à zéro à la précision machine près. Une fois que la relation (6.59) est bien vérifiée, nous pouvons présenter t_K sous forme de diagramme graphique pour visualisation.

• Propriété 2 : Nous définissons l'ensemble de tous les triades élémentaires qui contribue au transfert $t_f(k, p, q)$ par $G_{t_f}(k, p, q) = \left\{ t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \middle| |\boldsymbol{k}| \in S_k, |\boldsymbol{p}| \in S_p, |\boldsymbol{q}| \in S_q \right\}$. Donc le transfert $t_f(k, p, q)$ peut réécrire comme :

$$t_f(k, p, q) = \sum_{X \in G_{t_f}(k, p, q)} -\Re(X)$$
(6.61)

Si nous prenons p = k, c'est à dire nous regardons le transfert $t_f(k, k, q)$: pour tout transfert quelconque $t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \in G_{t_f}(k, k, q)$, on peut trouver un transfert $t_f^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$ qui est également à partir de l'ensemble $G_{t_f}(k, k, q)$, tel que : $t_f^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = -t_f^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$ (D'après la relation (6.58)). Donc la somme sur tout les éléments de $G_{t_f}(k, k, q)$ est null, donc :

$$t_f(k,k,q) = 0. (6.62)$$

6.4.1.3 Analyse de diagramme KPQ

A partir de l'état stationnaire de la DNS du cas a1, nous avons tracé le diagramme KPQ sur la figure 6.8. Nous présentons 8 coupes de $t_f(k, p, q)$ respectivement à k = 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80. Le transfert évolue souvent comme une fonction en puissance des échelles, et donc une vision linéaire n'est pas adaptée pour visualiser la distribution des transferts. Nous utilisons une échelle logarithmique, qui prend en compte le signe négatif et positif du transfert. Nous notons un trait blanc vertical très remarquable qui se situe à k = p, car $t_f(k, k, q) = 0$ comme prévu par (6.62).



FIGURE 6.8: Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du transfert d'énergie cinétique $t_f(k, p, q)$ basé sur la triade $(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$ dans le cas **Newtonien**. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair).

Le premier constat est que les positions des transferts sont similaires pour toutes les échelles. Quand nous regardons plus en détail une coupe donnée, nous constatons que les transferts importants se concentrent sur le côté gauche du diagramme (iso contours), et se séparent en 2 zones principales quelque soit l'échelle du fluide k:

- un gain d'énergie important $(t_f(k, p, q) > 0$ en rouge) lié à l'interaction des échelles q plus grandes que k dans son voisinage (q < k) avec les échelles de forçage $p \simeq 2, 3$.
- une perte d'énergie importante $(t_f(k, p, q) < 0$ en bleu) liée à l'interaction des échelles q plus petites que k dans son voisinage (q > k) avec les échelles de forçage $p \simeq 2, 3$.

Ce voisinage de transfert avec k reste étonnement constant quelque soit l'échelle considérée k et il couvre une zone étroite p < 5, k-5 < q < k+5 pour les iso-valeurs étendues $Max(s_{p\to f} - s_{p\to f}/50 < s_{p\to f} < Max(s_{p\to f}) + s_{p\to f}/50$. Ce transfert à l'échelle k s'effectue donc localement dans un voisinage étroit $q \simeq k$ mais avec une interaction non locale à l'échelle de forçage $p \simeq 2, 3$.

La cascade d'énergie à l'échelle k est donc caractérisée par un transfert d'énergie des grandes échelles $(t_f < 0, q < k)$ vers les petits échelles $(t_f > 0, q > k)$ dans le voisinage de l'échelle k $(q \simeq k)$. Ce transfert à l'échelle k s'effectue grâce à une interaction non locale entre son voisinage étroit $q \simeq k$ et l'échelle de forçage $p \simeq 2, 3$.

Nos résultats corroborent ceux de Domaraddski et al. [23] qui ont montré que les interactions triadiques étaient principalement non locales (c'est à dire grandes et petites échelles) mais qu'elles produisent un transfert local d'énergie. Ce type d'interaction est prédit théoriquement par Waleffe 1992 (instability assumption)[83] et Brasseur et al. 1991 [13]. Des diagrammes KPQ ont pu être analysés dans le cas des scalaires passifs [40] qui montre également des interactions non locales. Une question se pose pour les écoulements avec des polymères : quelle est la nature des échanges et des interactions non locales entre fluide et polymères?

6.4.2 Transfert d'énergie cinétique par advection : cas non Newtonien

On part de (6.32) et de (6.43) :

$$\frac{\partial}{\partial t}E_k(k) = T_f(k) + S_{p \to f}(k) - D_f(k) + F(k)$$
(6.63)

Sur la figure figure 6.9, on a représenté $t_f(k, p, q)$ obtenu dans le cas non Newtonien. Nous observons que les mécanismes de transfert sont très similaires au cas Newtonien : un transfert local avec une interaction non locale. Néanmoins, dans les petites échelles (k > 60), les transferts triadiques sont beaucoup plus localisés dans le cas **non-Newtonien** que dans le cas Newtonien.

6.4.3 Transfert d'énergie élastique par advection

On part de l'équation de Lin pour le polymère (6.44), et on s'intéresse au terme $T_p(k)$, en effectuant la décomposition similaire en triade :



FIGURE 6.9: Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du transfert d'énergie cinétique $t_f(k, p, q)$ basé sur la triade $(\widehat{\boldsymbol{w}}^{\boldsymbol{q}} \wedge \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}) \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$ dans le cas **non-Newtonien**. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair).

р

0e+00

On peut donc réécrire le terme de transfert $T_p(k)$ sous la forme

-1e-12

р

0e+00

1e-12

-1e-08

-1e-12

$$T_p(k) = \sum_{0 \ge p, q \ge N} t_p(k, p, q)$$
(6.64)

1e-08

1e-12

р

0e+00

-1e-11

1e-11

1e-07

 avec :

$$t_p(k, p, q) = \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_p, \boldsymbol{q} \in S_q, \boldsymbol{k} \in S_k \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} \Re \left(t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \right)$$
(6.65)

$$t_{p}^{(3D)}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = \left(\underline{i}\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{q}\right)\widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}}:\widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}}$$
(6.66)

6.4.3.1 Propriété du terme $t_p(k, p, q)$

• **Propriété 3 :** Puisque le transfert $t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})$ est non nul si $\boldsymbol{k} + \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} = 0$, nous pouvons donc remplacer \boldsymbol{p} par $(-\boldsymbol{q} - \boldsymbol{k})$ dans l'équation (6.66), et nous obtenons :

$$t_{p}^{(3D)}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p},\boldsymbol{q}) = \left(\left(-\underline{i}\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{k} \right) \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}} : \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} \left(-\underline{i}\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{p} \right) \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}} : \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}} \right) \quad (6.67)$$

La condition incompressible impose que $\boldsymbol{p} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} = 0$ pour tout \boldsymbol{p} , nous trouvons donc une symétrie importante :

$$t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = -t_P^{(3D)}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{k})$$
(6.68)

Nous pouvons montrer à partir de cette équation (6.68) que :

$$t_p(k, p, q) = -t_p(q, p, k)$$
 (6.69)

Pour chaque triade (k,p,q) nous retrouvons une triade de même valeur absolue et de signe opposé, donc la somme sur toutes les triades sont nulles (c'est bien un transfert) :

$$\sum_{k,p,q} t_p(k,p,q) = 0$$
(6.70)

Supposons que $t_p(k, p, q) < 0$, le transfert d'énergie élastique prend de l'énergie de la triade (k, p, q) et le donne à la triade (q, p, k). Cette démonstration est applicable à toutes les quantités transportées par la turbulence.

• **Propriété 4**: De façons similaire avec $G_{t_f}(k, p, q)$, nous allons définir l'ensemble $G_{t_p}(k, p, q) = \left\{ t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \middle| |\boldsymbol{k}| \in S_k, |\boldsymbol{p}| \in S_p, |\boldsymbol{q}| \in S_q \right\}$. Donc le transfert $t_p(k, p, q)$ peut réécrire comme :

$$t_p(k, p, q) = \sum_{X \in G_{t_p}(k, p, q)} - \Re(X)$$
(6.71)

Si nous prenons q = k, c'est à dire nous regardons le transfert $t_f(k, p, k)$: pour tout transfert quelconque $t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \in G_{t_p}(k, p, k)$, on peut trouver un transfert $t_p^{(3D)}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{k})$ qui est également à partir de l'ensemble $G_{t_p}(k, q, k)$, tel que : $t_p^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = -t_p^{(3D)}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{k})$ (D'après la relation (6.68)). Donc la somme sur tout les éléments de $G_{t_p}(k, q, k)$ est null, donc :

$$t_p(k, p, k) = 0. (6.72)$$



CHAPITRE 6. TRANSFERT D'ÉNERGIE ÉCHELLE PAR ÉCHELLE

FIGURE 6.10: Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du transfert d'énergie élastique par advection $t_p(k, p, q)$ basé sur la triade $(\widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{q}) \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}} : \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{k}}$. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair)

6.4.3.2 Analyse de diagramme KPQ

Sur la figure 6.10, nous constatons alors que la distribution des transferts est très similaire à ceux de l'advection de l'énergie cinétique. Ce résultat est intuitif : l'advection d'une énergie par la turbulence est un mécanisme de transport. C'est similaire pour toutes les quantités transportées.

La cascade d'énergie à l'échelle k est donc caractérisée par un transfert d'énergie élastique des grandes échelles du polymère $(t_p < 0, q < k)$ vers les petits échelles du polymère $(t_f > 0, q > k)$ dans le voisinage de l'échelle k $(q \simeq k)$. Ce transfert à l'échelle k s'effectue localement dans un voisinage étroit $q \simeq k$ mais avec une interaction non locale à l'échelle de forçage $p \simeq 2, 3$.

Une différence notable par rapport à l'advection de l'énergie cinétique est que nous n'avons pas de trait blanc horizontal à p = k mais un trait vertical. Ce trait blanc peut être expliqué par les propriétés de symétrie (6.72).

6.4.4 Échange d'énergie entre turbulence et polymère

On rappelle les équations de Lin (6.43) et (6.44) :

$$\partial_t E_K(k) = T_f(k) - D_f(k) + S_{p \to f}(k) + F(k)$$
(6.73)

$$\partial_t E_p(k) = T_p(k) - R_p(k) + S_{f \to p}(k) + T_a(k) + D_a(k)$$
 (6.74)

On peut donc réécrire les termes d'échange $S_{p\to f}(k)$ et $S_{f\to p}(k)$ sous la forme

$$S_{p \to f}(k) = \sum_{0 \ge p, q \ge N} s_{p \to f}(k, p, q)$$

$$(6.75)$$

$$S_{f \to p}(k) = \sum_{0 \ge p,q \ge N} s_{f \to p}(k, p, q)$$
 (6.76)

(6.77)

avec :

$$s_{p \to f}(k, p, q) = \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_p, \boldsymbol{q} \in S_q, \boldsymbol{k} \in S_k \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} \Re \left(s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \right)$$
(6.78)

$$s_{f \to p}(k, p, q) = \sum_{\substack{\boldsymbol{p} \in S_p, \boldsymbol{q} \in S_q, \boldsymbol{k} \in S_k \\ \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k} = 0}} \Re \left(s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) \right)$$
(6.79)

où :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = \underline{i} \boldsymbol{k} \cdot \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}} \cdot \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{k}}$$
(6.80)

$$s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = (\underline{i}\boldsymbol{p} \times \widehat{\boldsymbol{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{q}}) : \widehat{\boldsymbol{B}}^{\boldsymbol{\kappa}}$$
(6.81)

Les expressions sont simplifiées en utilisant l'hypothèse de "l'étirement modéré", où nous supposons que la force de rappel des polymères est linéaire par rapport à l'extension des polymères (c.f. chapitre II). **6.4.4.1** Propriété du terme $s_{p \to f}(k, p, q)$ et $s_{f \to p}(k, p, q)$

• **Propriété 5 :** Nous pouvons constater facilement (à partir de la définition) sur ces transferts élémentaires qu'il existe 2 symétries :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$$
(6.82)

$$s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{k})$$
(6.83)

Cela impose une condition sur le diagramme KPQ de $s_{p\to f}$ et $s_{f\to p}$:

$$s_{p \to f}(k, p, q) = s_{p \to f}(k, q, p) \tag{6.84}$$

$$s_{f \to p}(k, p, q) = s_{f \to p}(q, p, k) \tag{6.85}$$

• **Propriété 6 :** Nous pouvons également identifier un couple de triade de même valeur et de signe opposé (voir démonstration dans l'annexe 7.2) :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = -s_{f \to q}^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$$
(6.86)

Il s'agit donc bien des termes de transfert (conservation d'énergie). Cette propriété se traduit par une liaison entre $s_{p\to f}(k, p, q)$ et $s_{f\to p}(k, p, q)$:

$$s_{p \to f}(k, p, q) = -s_{f \to q}(p, k, q)$$
 (6.87)

6.4.4.2 Echange du polymère vers le fluide $s_{p \to f}$

Sur la figure 6.11, nous présentons quelques coupes du diagramme $s_{p\to f}(k, p, q)$ pour différentes valeurs de k. Cette figure est à mettre en parallèle avec le transfert total $S_{p\to f}(k)$ de la figure 6.4.

Les caractéristiques principales de ce transfert sont les suivantes :

- pour les grandes échelles du fluide (k = 10 et k = 20) le polymère pompe globalement de l'énergie du fluide (sur la figure 6.4, on a globalement $s_{p\to f}(k, p, q) < 0$, la couleur bleu domine) en accord avec $S_{p\to f}(k) < 0$ de la figure 6.4. Cet échange négatif s'effectue **le long des 2 bords** du diagramme KPQ (p = k + q et q = k + p) ce qui veut dire que le transfert est très étalé en échelle (fortement non local et s'effectue sur les modes colinéaires (voir figure 6.7). Néanmoins il existe toujours quelques échanges dans le sens inverse $s_{p\to f}(k, p, q) > 0$ (la couleur rouge).
- pour le plus petite échelle k ≥ 30, c'est l'inverse qui s'observe : le polymère donne de l'énergie au fluide s_{p→f}(k, p, q) > 0 (la couleur rouge domine). Cela est en accord avec le signe de S_{p→f}(k) > 0 de la figure 6.4 et qui change pour k = 25. Ce gain d'énergie pour le fluide s'effectue aussi le long des 2 bords du diagramme KPQ (p = k + q et q = k + p) ce qui veut dire que le transfert est très étalé en échelle (fortement non local) et s'effectue sur les modes colinéaires (voir figure 6.7). Néanmoins il existe toujours quelques échanges dans le sens inverse s_{p→f}(k, p, q) < 0 (la couleur bleu) mais moins intense.

Vue du fluide, il y a comme une "cascade" propre au polymère qui produit transfert de l'énergie des grandes échelles fluides vers les petites échelles fluides. Néanmoins, le voisinage du transfert est très non locale avec une interaction non locale contrairement au terme classique d'advection qui est locale en transfert mais non local en interaction.



FIGURE 6.11: Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du transfert d'énergie du polymère vers le fluide $s_{p\to f}(k, p, q)$ basé sur la triade $\mathbf{k} \cdot \widehat{\mathbf{B}}^{\mathbf{p}} \cdot \widehat{\mathbf{B}}^{\mathbf{q}} \cdot \widehat{\mathbf{u}}^{\mathbf{k}}$. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair).

6.4.4.3 Echange du fluide vers le polymère $s_{f \rightarrow p}$

Sur la figure 6.12, nous présentons quelques coupes du diagramme $s_{f\to p}(k, p, q)$ pour des différentes valeurs de k. Cette figure est à mettre en parallèle avec le transfert total $S_{f\to p}(k)$ de la figure 6.4.

Les caractéristiques principales de ce transfert est que quelque soit l'échelle k du polymère, il y a toujours globalement un gain d'énergie $s_{f\to p} > 0$ lié à l'interaction des grandes échelles de vitesse liée au forçage $p \simeq 2,3$ qui cisaille les échelles du polymère q (terme de stretching) dans un voisinage de l'échelle $q \simeq k$. Ce voisinage reste étonnement constant quelque soit l'échelle considérée k et il couvre une zone large p < 20, k - 15 < q < k + 15 pour les iso-valeurs étendues $Max(s_{f\to p}) - s_{f\to p}/50 < s_{f\to p} < Max(s_{f\to p}) + s_{f\to p}/50$. Le transfert reste donc local mais étalé avec une interaction non locale.

Par contre, quelque soit les échelles k > 30 du polymère, au delà d'une petite échelle de vitesse $p \simeq 25$, ce stretching engendre majoritairement une perte $s_{f \to p} < 0$ (partie des bandes du rectangle en bleu). Cela correspond majoritairement à l'interaction des échelles du polymère p plus grandes que $k \simeq 25 > p$ avec les grandes échelles du forçage k > q > 2,3 principalement. Le transfert est donc non local avec une interaction non locale.

6.4.4.4 Nature des échanges du fluide et du polymère

On vérifie bien la propriété (6.87) $s_{f\to p}(k, p, q) = -s_{p\to f}(p, k, q)$ (inversion des indices). En effet, sur la figure 6.13 on a tracé $s_{f\to p}(k, p, q)$, pour k fixé et p variable, qui se superpose à $-s_{p\to f}(k, p, q)$, pour p fixé et k variable (inversion des indices).

On observe bien qu'en dessous de $k \simeq 25$, on a globalement $-s_{p\to f}(k, p, q) > 0$ donc le polymère pompe de l'énergie fluide pour toutes les échelles voisines de kalors qu'au dessus de $k \simeq 25$, on a bien un gain d'énergie $-s_{p\to f}(p, k, q) < 0$ mais sur un voisinage étalé du à l'interaction entre le polymère et fluide. C'est bien en accord avec $S_{p\to f}$ de la figure 6.4.

On en conclut que chaque échelle du fluide interagit directement avec toutes les échelles des polymères en même temps et de la même manière. Ce mécanisme est différent du transfert par advection, qui est une cascade locale, échelle par échelle (les transferts sont forts quand les modes sont proches, et décroissent suivant une loi de puissance quand les modes s'éloignent). Ici, les triades dominantes sont des triades composées d'un mode grande échelle (faible longueur d'onde) de la vitesse du fluide, et de 2 modes de même taille des polymères.

6.4.5 Transfert $T_a(k)$

Nous avons vu dans la section 6.3 que le terme $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ qui a le rôle d'équilibrer la partie non symétrique du terme $\mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}$ est faible par rapport aux autres termes.

Nous pouvons montrer que $\sum_{k \in \mathbb{Z}} T_a(k) = 0$ (voir l'annexe 7.3), donc si nous négligeons ce terme, l'énergie du système est toujours conservé.

En plus, comme nous avons vu dans la partie bilan d'énergie 6.3.1 que la contribution de ce terme reste petite en comparaison des autres, nous pouvons



FIGURE 6.12: Diagramme triadique KPQ pour différentes coupes à k fixé du transfert d'énergie de fluide vers les polymères $s_{f\to p}(k, p, q)$ basé sur la triade $(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{\widehat{u}}^{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\widehat{B}}^{\boldsymbol{q}}) : \boldsymbol{\widehat{B}}^{\boldsymbol{k}}$. Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair). Le trait noir verticale à P = 25 marque un chagement de signe de transfert, qui est un peu près fixe à tout les échelles



FIGURE 6.13: Comparaison entre la coupe à p fixé de $-s_{p\to f}(k, p, q)$ (à gauche) avec la coupe à k fixé de $s_{f\to p}(k, p, q)$ (à droite). Les iso-contours sont tracés à partir du maximum de la valeur absolue des transferts (Max) : (Max)/50 (jaune) et -(Max)/50 (bleu clair).

donc négliger ce terme.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons effectué les analyses dans l'espace spectral, afin de comprendre les distributions d'énergie cinétique et élastique échelle par échelle. Nous avons observé que 2 lois de puissance émergent respectivement pour l'énergie élastique des polymères $(E_p \sim k^{-2})$ et l'énergie cinétique du fluide $(E_K \sim k^{-6})$ dans la zone où l'éffet de couplage est fort.

Nous avons établi un dimensionnement qui prédit assez bien l'intensité des spectres dans notre plage de paramètres. L'explication rigoureuse des lois de puissance n'est pas encore trouvée.

Nous avons relevé également que le mécanisme de transfert d'énergie entre la turbulence et les polymères est un transfert non local et une interaction non locale : les grandes échelles du fluide contribuent principalement au transfert d'énergie, mais chaque mode du fluide interagit avec tous les modes de polymères des différentes échelles qui sont colinéaires avec lui.

| Chapitre

Conclusions

Les travaux effectués dans le cadre de cette thèse se focalisent sur l'interaction entre une turbulence homogène et isotrope avec une petite concentration des polymères à des faibles nombre de Reynolds et nombre de Weissenberg. Les paramètres choisis sont en dehors de la plage où on a la turbulence élastique et la turbulence élasto-inertielle.

Nous avons montré que, dans cette gamme de paramètres, l'extension moyenne des polymères, qui est proportionnelle à l'énergie élastique emmagasinée, peut être estimée en fonction de la rms du gradient de vitesse locale et du temps de relaxation. L'écoulement avec la présence des polymères conserve certains comportements statistiques par rapport à l'écoulement turbulent Newtonien, notamment la forme de la PDF de la vitesse, la forme des grandes structures (manifestée par la fonction d'auto-corrélation), la PDF de l'incrément de vitesse, ... sont peu changées. Par contre, nous trouvons des changements significatifs pour les grandeurs sensibles aux petites échelles. Il y a encore beaucoup d'analyses possibles dans l'espace physique que nous n'avons pas encore abordé dans cette thèse.

Une analyse plus détaillée de la distribution échelle par échelle de l'énergie cinétique turbulente démontre l'émergence d'une loi de puissance $E_K(k) \sim k^{-6}$ dans la zone dissipative. Nous avons montré que ce comportement peut être expliqué par l'injection de l'énergie qui provient des polymères et va vers le fluide, ce qui forme un équilibre avec la dissipation visqueuse. A noter que l'observation de cette loi de puissance n'est possible qu'avec une très faible diffusion artificielle avec une résolution spectrale au delà de l'échelle de Kolmogorov ($k\eta \ge 6$). L'importance de l'utilisation le moins possible de la diffusion artificielle était déjà suggéré dans les références [77, 27].

Une analyse similaire appliquée à la dynamique des polymères rencontre une difficulté conceptuelle : l'interaction entre polymère et turbulence est un mécanisme non linéaire, mais la non linéarité est masquée dans les modèles constitutifs car ils emploient le tenseur C comme variable d'état des polymères, qui est une fonction de corrélation d'ordre 2 de la variable d'état des polymères dans les modèles microscopiques (qui est le vecteur bout à bout \mathbf{R} d'une molécule de polymère). Cette considération Les travaux effectués dans le cadre de cette thèse se focalisent sur l'interaction entre une turbulence homogène et isotrope avec une petite concentra-

tion des polymères à des faibles nombre de Reynolds et nombre de Weissenberg. Les paramètres choisis sont en dehors de la plage où on a la turbulence élastique et la turbulence élasto-inertielle.

Nous avons montré que, dans cette gamme de paramètres, l'extension moyenne des polymères, qui est proportionnelle à l'énergie élastique emmagasinée, peut être estimée en fonction de la rms du gradient de vitesse locale et du temps de relaxation. L'écoulement avec la présence des polymères conserve certains comportements statistiques par rapport à l'écoulement turbulent Newtonien, notamment la forme de la PDF de la vitesse, la forme des grandes structures (manifestée par la fonction d'auto-corrélation), la PDF de l'incrément de vitesse, ... sont peu changées. Par contre, nous trouvons des changements significatifs pour les grandeurs sensibles aux petites échelles. Il y a encore beaucoup d'analyses possibles dans l'espace physique que nous n'avons pas encore abordé dans cette thèse.

Une analyse plus détaillée de la distribution échelle par échelle de l'énergie cinétique turbulente démontre l'émergence d'une loi de puissance $E_K(k) \sim k^{-6}$ dans la zone dissipative. Nous avons montré que ce comportement peut être expliqué par l'injection de l'énergie qui provient des polymères et va vers le fluide, ce qui forme un équilibre avec la dissipation visqueuse. A noter que l'observation de cette loi de puissance n'est possible qu'avec une très faible diffusion artificielle avec une résolution spectrale au delà de l'échelle de Kolmogorov ($k\eta \ge 6$). L'importance de l'utilisation le moins possible de la diffusion artificielle était déjà suggéré dans les références [77, 27].

Une analyse similaire appliquée à la dynamique des polymères rencontre une difficulté conceptuelle : l'interaction entre polymère et turbulence est un mécanisme non linéaire, mais la non linéarité est masquée dans les modèles constitutifs car ils emploient le tenseur C comme variable d'état des polymères, qui est une fonction de corrélation d'ordre 2 de la variable d'état des polymères dans les modèles microscopiques (qui est le vecteur bout à bout \mathbf{R} d'une molécule de polymère). Cette considération induit des effets non physiques, notamment la perte de caractère défini et positif du tenseur C au cours de la simulation, et deuxièmement nous ne pouvons pas bâtir une équation bilan d'énergie complète du système. Avec un algorithme de factorisation, le tenseur C est transformé en carré d'une matrice B. En utilisant le tenseur B comme variable d'état, nous bénéficions plusieurs avantages : le tenseur C est assuré d'être défini positif, le schéma numérique est plus résilient aux instabilités numériques, et nous retrouvons la non linéarité présentée dans les modèles microscopiques, ce qui nous permet d'établir un bilan de distribution d'énergie échelle par échelle.

Avec ce nouveau bilan d'énergie, nous pouvons comparer quantitativement l'amplitude des différents mécanismes à toutes les échelles. Nous constatons que dans notre simulation, la dynamique des polymères est gouvernée principalement par 2 mécaniques principaux : l'étirement par le fluide et la relaxation par l'effet de l'entropie. Il existe un transfert d'énergie élastique par le transport turbulent mais son effet reste faible par rapport à ces 2 derniers mécanismes. Nous confirmons que l'injection d'énergie de turbulence vers les polymères est le seul mécanisme qui permet de maintenir l'extension des polymères, est c'est ce mécanisme qui est responsable de la formation d'une loi de puissance proportionnelle à k^{-2} . Une des plus importantes questions que l'on se pose en étudiant l'interaction turbulence - polymère est d'identifier quelle échelle de turbulence contribue le plus à l'injection d'énergie vers les polymères : car les grandes échelles sont plus énergétiques, mais en même temps elles sont très lentes pour maintenir une extension. A contrario les plus petites échelles sont moins énergétiques, mais plus actives en terme de fréquence. Nos outils d'analyse nous ont permis de quantifier la contribution des différentes échelles turbulentes à l'effet de couplage et donc quantifier l'échelle qui joue le rôle le plus important dans la dynamique des polymères. Dans notre simulation, comme nous avons une échelle de Lumley qui est du même ordre que grandeur que l'échelle intégrale, nous constatons que les grandes échelles qui contiennent le plus d'énergie contribuent principalement à l'étirement des polymères. Avec notre gamme de paramètres assez restreintes dans le cadre de cette thèse, nous ne pouvons pas confirmer que ce comportement est universel et avoir une réponse complète à cette question.

Avec notre analyse, nous trouvons naturellement une explication pour l'injection d'énergie des polymères vers la turbulence : si nous considérons C comme variable représentative des polymères, les interactions sont linéaires donc les échelles de la turbulence ne peuvent interagir qu'avec des échelles de même taille que celles des polymères. Entre les grandes échelles où le polymère reçoit de l'énergie et les petites échelles où le polymère donne de l'énergie, il devrait y avoir un changement de structure et la différences entre ces 2 états s'est pas expliquée. Avec notre point de vue, où on considère le tenseur B comme variable d'état, les interactions sont non linéaires, ce qui implique que toutes les échelles de la turbulence peuvent interagir simultanément avec tout les échelles des polymères et inversement. Nous observons que les polymères n'ont pas une échelle particulière où il y aura un changement de comportement : le spectre de polymère continu garde la même pente, et il existe 2 flux d'énergie séparés qui transfère d'énergie de la turbulence vers les polymères $(S_{f \to p})$ et inversement $(S_{p \to f})$. L'inversion de signe du transfert d'énergie aura lieu au moment où le flux d'énergie des polymères vers le fluide devient dominant par rapport au flux d'énergie de turbulence vers les polymères.

En considérant l'énergie totale du système, c'est à dire que nous ne distinguons plus l'énergie cinétique turbulente de l'énergie élastique des polymères, nous pouvons déduire que le système total comprend 4 mécanismes principaux : l'injection d'énergie aux grandes échelles, le transfert d'énergie par la convection de l'énergie cinétique, le transfert d'énergie par l'advection de l'énergie élastique, et l'effet de couplage. L'effet de couplage T_S peut être défini comme la somme de 2 flux d'énergie : $T_S = S_{p \to f} + S_{f \to p}$. Par conservation d'énergie, la somme totale de ces 2 flux d'énergie doit être nulle, donc : $\int_{0}^{\infty} T_S(k) dk = 0$, cela peut être vu comme un mécanisme de transfert d'énergie des grandes échelles vers les plus petites. La particularité de ce transfert est que : le gain/perte de l'énergie cinétique (due à l'éffet de couplage) dans les structures fluide d'une taille donnée ne correspond pas directement aux structures des polymères de la même taille, et une quantité d'énergie des grandes échelles du fluide est injectée vers les petites échelles au travers des polymères.

Nous pouvons aller encore plus loin dans l'analyse spectrale, en examinant les

transferts d'énergie mode par mode, à l'aide d'observations qualitatives des diagrammes KPQ, qui comparent en ordre de magnitude des échanges entres toutes les échelles. Nos diagrammes ont montré qu'à côté des transferts d'énergie classiques par la convection/advection, le transfert d'énergie entre polymère et turbulence est complètement différent : chaque échelle de turbulence interagit de la même façon avec tout les échelles de polymères, mais chaque échelle de polymère n'interagir qu'avec les structures de turbulence à grande échelle. Ce résultat explique comment les échelles de turbulence (même l'échelle de Kolmogorov, qui est la plus petite échelle motrice de la turbulence) qui sont très grandes (par rapport aux échelles des polymères) peuvent interagir avec les polymères aux échelles très petites.

Avec les résultats présentés, nous avons éclairci des mécanismes qui constituent une pièce de puzzle dans la grande image des interactions entre turbulence et polymères. Notre outils d'analyse peuvent être utilisés pour exploiter des autres régions de paramètres pour bâtir un modèle universelle.

Annexe

Sommaire

7.1	Plus de détail sur la square root formulation 168
7.2	Démonstration : transfert d'énergie entre polymère et
	fluide
7.3	Démonstration : $\sum T_a(k) = 0$
	$k{\in}\mathbb{Z}$
7.4	Fonction Dirac
7.5	Figure PDF de l'incrément de vitesse

1

7.1 Plus de détail sur la square root formulation

Nous allons démontrer que l'équation (4.40) implique l'équation (4.38) : — Étape 1 : Prenons l'équation (4.40) multiplions la avec \mathbf{B}^T à gauche

- Etape 1 : Prenons I equation
$$(4.40)$$
, multiplions la avec **B** a gauche :

$$\boldsymbol{B}^{T} \cdot \partial_{t} \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^{T} \cdot \mathbf{u} \nabla \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}^{T} \cdot \boldsymbol{B} \nabla \mathbf{u} + \boldsymbol{B}^{T} \cdot (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}) + \boldsymbol{B}^{T} \cdot \frac{1}{2\tau} (\mathcal{P}(\boldsymbol{B}^{T} \boldsymbol{B}) \cdot \boldsymbol{B} - (\boldsymbol{B}^{T})^{-1})$$
(7.1)

Après réduction, nous avons :

$$\boldsymbol{B}^{T} \cdot \partial_{t} \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^{T} \cdot (\boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{B}) = \boldsymbol{C} \cdot \nabla \boldsymbol{u} + \boldsymbol{B}^{T} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \frac{1}{2\tau} \left\{ \mathcal{P}(\boldsymbol{C}) \cdot \boldsymbol{C} - \boldsymbol{I} \right\}$$
(7.2)

Étape 2 : Prenons la transposée de l'équation (7.2) on a :

$$(\partial_t \boldsymbol{B}^T) \cdot \boldsymbol{B} + (\mathbf{u} \nabla \boldsymbol{B}^T) \cdot \boldsymbol{B} = (\nabla \mathbf{u})^T \cdot \boldsymbol{C} + \boldsymbol{B}^T \cdot \boldsymbol{A}^T \cdot \boldsymbol{B} + \frac{1}{2\tau} (\mathcal{P}(\boldsymbol{C}) \cdot \boldsymbol{C} - \boldsymbol{I})$$
(7.3)

— Étape 3 : Nous obtenons l'équation (4.38) en sommant les deux équations obtenues (7.2) et (7.3), sachant que :

$$\partial_t (\boldsymbol{B}^T \boldsymbol{B}) = \partial_t (\boldsymbol{B}^T) \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^T \partial_t (\boldsymbol{B})$$

 $\mathbf{u} \nabla (\boldsymbol{B}^T \boldsymbol{B}) = \mathbf{u} \nabla (\boldsymbol{B}^T) \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^T \mathbf{u} \nabla (\boldsymbol{B})$
 $\boldsymbol{A}^T = -\boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^T \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{B} = 0$

nous obtenons finalement l'équation (4.38). Donc l'équation (4.40) implique l'équation (4.38).

Nous imposons en plus une condition de symétrie pour B pour que la décomposition soit unique. Pour une décomposition unique, nous pouvons dire que l'équation (4.40) est équivalente à l'équation (4.38).

Pour que **B** soit symétrique, il faut que l'équation (4.40) soit symétrique. Tous les termes de cette équation sont naturellement symétriques, en considérant **B** symétrique, sauf le terme : $\mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$.

En imposant une condition de symétrie sur ce terme , nous pouvons trouver une matrice unique A antisymétrique. L'équation (4.40) peut donc être réduite d'un système de 9 équations (9 équations correspondent aux 9 éléments d'une matrice 3×3) à un système de 6 équations. Cette simplification réduit considérablement le temps de calcul et la mémoire de stockage.

Soit la matrice antisymétrique A :

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} \\ -a_{12} & 0 & a_{23} \\ -a_{13} & -a_{23} & 0 \end{pmatrix}$$

Le produit $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}$ s'écrit :

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} a_{12}b_{12} + a_{13}b_{13} & a_{12}b_{22} + a_{13}b_{23} & a_{12}b_{23} + a_{13}b_{33} \\ -a_{12}b_{11} + a_{23}b_{13} & -a_{12}b_{12} + a_{23}b_{23} & -a_{12}b_{13} + a_{23}b_{33} \\ -a_{13}b_{11} - a_{23}b_{12} & -a_{13}b_{12} - a_{23}b_{22} & -a_{13}b_{13} - a_{23}b_{23} \end{pmatrix}$$
(7.4)

nous calculons la matrice $\mathbf{M} = (M_{ij}) = \mathbf{B} \cdot \nabla \mathbf{u}$

La condition de symétrie de la matrice : $\mathbf{N} = (N_{ij}) = \mathbf{M} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ nous donne un système de 3 équations à 3 inconnues :

$$N_{12} = N_{21} \to a_{12}b_{22} + a_{13}b_{23} + M_{12} = -a_{12}b_{11} + a_{23}b_{13} + M_{21}$$
(7.5)

$$N_{13} = N_{31} \to a_{12}b_{23} + a_{13}b_{33} + M_{13} = -a_{13}b_{11} - a_{23}b_{12} + M_{31}$$
(7.6)

$$N_{23} = N_{21} \to -a_{12}b_{13} + a_{23}b_{33} + M_{23} = -a_{13}b_{12} - a_{23}b_{22} + M_{23}$$
(7.7)

En résolvant ce système, nous obtenons la matrice A [3].

7.2 Démonstration : transfert d'énergie entre polymère et fluide

Dans cette partie nous allons démontrer que :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = -s_{f \to q}^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$$
(7.8)

La démonstration est directe avec l'écriture indicielle :

- Nous pouvons écrire $\widehat{B}_{ij}^{\mathbf{k}} = \widehat{B}_{im}^{\mathbf{k}} \delta_{mj}$, donc $s_{f \to p}^{(3D)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\widehat{B}_{im}^{\mathbf{k}} \, \widehat{B}_{im}^{\mathbf{p}} \, \underline{i} \, q_m \, \widehat{u}_j^{\mathbf{q}}) \, \delta_{mj}$. Or, \mathbf{B} est une matrice symétrique $\widehat{B}_{im}^{\mathbf{k}} = \widehat{B}_{mi}^{\mathbf{k}}$ nous avons :

$$s_{f \to p}^{(3D)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\widehat{B}_{mi}^{\mathbf{k}} \ \widehat{B}_{im}^{\mathbf{p}} \ \underline{i} \ q_m \ \widehat{u}_j^{\mathbf{q}}) \delta_{mj}$$
(7.9)

— De plus, nous pouvons écrire que $\hat{u}_i^{\mathbf{k}} = \hat{u}_m^{\mathbf{k}} \delta_{mi}$, et nous obtenons :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = -(\widehat{B}_{il}^{\mathbf{p}} \ \widehat{B}_{lj}^{\mathbf{q}} \ \underline{i} \ k_j \ \widehat{u}_m^{\mathbf{k}}) \ \delta_{mi}$$
(7.10)

Si nous comparons les 2 équations (7.10) et (7.9), nous avons :

$$s_{f \to p}^{(3D)}(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = -s_{p \to f}^{(3D)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k})$$
(7.11)

Le symétrie dans l'équation (7.11) permet de vérifier la conservation d'énergie de l'échange (fluide vers polymères) et (polymères vers fluide) dans le système de l'équation de Lin :

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}} S_{p\to f}(k,t) + S_{f\to p}(k,t)$$
$$= \sum_{k\in\mathbb{Z}} \sum_{\boldsymbol{k}\in S_k} \frac{\nu_p}{\tau_p} \left[\Re\left(\sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}=\mathbf{0}} t_{f\to p}(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}) + t_{p\to f}(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q})\right) \right] = 0 \quad (7.12)$$

La somme des 2 termes $S_{p\to f}(k,t) + S_{f\to p}(k,t)$ peut être vu comme un transfert d'énergie, noté $T_s(k)$. En plus, nous pouvons unifier les 2 termes d'échanges $s_{f\to p}^{(3D)}$ et $s_{p\to f}^{(3D)}$ en un seul, noté $t_s^{(3D)}(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q})$: En combinant toutes les symétries (équation (7.8)), (6.82) et (6.83) nous avons :

$$s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = s_{p \to f}^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = -s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = -s_{f \to p}^{(3D)}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{k}) = t_s^{(3D)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})$$
(7.13)

7.3 Démonstration : $\sum_{k \in \mathbb{Z}} T_a(k) = 0$

Dans cette section, nous allons démontrer que ce terme $(T_a(k))$ dans l'équation (6.44)est un terme de transfert d'énergie. Donc introduire ce terme ou le négliger n'affecte pas la conservation de l'énergie. L'expression de $T_a^{\mathbf{k}}$ est :

$$T_{a}^{\mathbf{k}} = 2.K_{p}.\Re\left(\widehat{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}^{\mathbf{k}}:\overline{\widehat{\mathbf{B}}}^{\mathbf{k}}\right)$$
(7.14)

Nous le réécrivons avec la propriété de symétrie Hermitienne $\overline{\hat{B}_{ij}}^{\mathbf{k}} = \widehat{B}_{ij}^{-\mathbf{k}}$:

$$T_{a}^{\mathbf{k}} = 2K_{p} \Re \left(\overline{\widehat{B}_{ij}}^{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}=\mathbf{k}} \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}} \right) = 2K_{p} \Re \left(\widehat{B_{ij}}^{-\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}=\mathbf{k}} \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}} \right)$$
(7.15)

Avec le changement de variable $(-\mathbf{k}) \rightarrow \mathbf{k}$, nous avons :

$$T_{a}^{\mathbf{k}} = 2K_{p} \Re \left(\sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}=\mathbf{0}} \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} \cdot \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \cdot \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}} \right)$$
$$= 2K_{p} \Re \left(\sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}=\mathbf{0}} \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} \cdot \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \cdot \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}} \right) = 2K_{p} \Re \left(\sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}=\mathbf{0}} t_{a}(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}) \cdot \right)$$

Nous avons décomposé le terme $T_a^{\mathbf{k}}$ en une somme (ou intégrale) des interactions triadiques plus élémentaires $t_a(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}}$. Nous pouvons écrire $\widehat{B}_{ij} = \widehat{B}_{im} \delta_{mj} = \widehat{B}_{mi} \delta_{mj}$, puisque (\widehat{B}_{ij}) est une matrice

Nous pouvons écrire $\widehat{B}_{ij} = \widehat{B}_{im}\delta_{mj} = \widehat{B}_{mi}\delta_{mj}$, puisque (\widehat{B}_{ij}) est une matrice symétrique, nous avons : $t_a(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \delta_{mj}\widehat{\widehat{B}_{mi}}^{\mathbf{k}}\widehat{A}_{il}^{\mathbf{p}}.\widehat{\widehat{B}_{lj}}^{\mathbf{q}}.$

Nous pouvons également écrire $\widehat{B}_{lj} = \widehat{B}_{lm}\delta_{mj} = \widehat{B}_{ml}\delta_{mj}$ pour la même raison. En plus, la matrice \widehat{A} est antisymétrique, on a : $\widehat{A}_{il}^{\mathbf{p}} = -\widehat{A}_{li}^{\mathbf{p}}$.

Nous pouvons faire des transformations suivant :

$$t_{a}(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q}) = \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} \cdot \widehat{A_{il}}^{\mathbf{p}} \cdot \widehat{B_{lj}}^{\mathbf{q}} = \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} (-\widehat{A_{li}}^{\mathbf{p}}) \widehat{B_{ml}}^{\mathbf{q}} \delta_{mj} = -\delta_{mj} \widehat{B_{ml}}^{\mathbf{q}} \widehat{A_{li}}^{\mathbf{p}} \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} = -\widehat{B_{jl}}^{\mathbf{q}} \widehat{A_{li}}^{\mathbf{p}} \widehat{B_{ij}}^{\mathbf{k}} = -t_{a}(\mathbf{q},\mathbf{p},\mathbf{k}) \quad (7.16)$$

Finalement, nous pouvons sommer des triades de même taille et nous obtenons :

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}} T_a(k,t) = 2.K_p.\sum_{k\in\mathbb{Z}} \sum_{\boldsymbol{k}\in S_k} \left[\Re\left(\sum_{\mathbf{p}+\mathbf{q}+\mathbf{k}=\mathbf{0}} t_a(\mathbf{k},\mathbf{p},\mathbf{q})\right) \right] = 0$$
(7.17)

car si nous sommons sur toutes les triades, pour une triade donnée $t_a(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q})$ nous pouvons trouver une triade opposée $t_a(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{k}) = -t_a(\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q})$, donc la somme doit être zéro.

7.4 Fonction Dirac

On introduit la fonction de Dirac qui est une distribution extrêmement pointue qui concentre son intégrale en 1 point :

$$\delta(\mathbf{0}) = +\infty \tag{7.18}$$

$$\delta(\boldsymbol{x}) = 0 \ si \ \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \tag{7.19}$$

$$\int \delta(\boldsymbol{x}) d^3 \boldsymbol{x} = 1 \tag{7.20}$$

La fonction de Dirac peut être définie par :

$$\delta_{\boldsymbol{x}_{0}}(x) = \lim_{a \to 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{\frac{-(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{0})^{2}}{a^{2}}}$$
(7.21)

Attention, il existe plusieurs définitions de la fonction de Dirac, car elle est une fonction généralisée, et la notion "égale" est étendue pour les fonctions généralisées comme : 2 fonctions f(x) et g(x) sont égales si et seulement si :

$$\int f(x)h(x)dx = \int g(x)h(x)dx$$
(7.22)

pour toutes les fonctions h(x) intégrable.

Pour simplifier, nous notons $\delta(\boldsymbol{x}) = \delta_0(x)$, on a donc :

$$\delta \boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) \tag{7.23}$$

Cette fonction a une particularité :

$$\iiint_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3} \delta_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x}) f(\boldsymbol{x}) d^3 \boldsymbol{x} = f(\boldsymbol{x}_0)$$
(7.24)

A partir de cette propriété nous pouvons appliquer la transformée de Fourier inverse à la fonction Dirac et on obtient donc :

$$\iiint_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{3}}\delta_{\boldsymbol{k}_{0}}(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}d^{3}\boldsymbol{x}=e^{i\boldsymbol{k}_{0}\cdot\boldsymbol{x}}$$
(7.25)

Nous avons donc :

$$TF(e^{i\boldsymbol{k}_0.\boldsymbol{x}}) = \delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0)$$
(7.26)

7.5 Figure PDF de l'incrément de vitesse



FIGURE 7.1: Incrément de vitesse pour le cas a1 (Newtonien)

172



FIGURE 7.2: Incrément de vitesse pour le cas b1 (Newtonien)



FIGURE 7.3: Incrément de vitesse pour le cas c1 (Newtonien)



FIGURE 7.4: Incrément de vitesse pour le cas a6 (Newtonien)



FIGURE 7.5: Incrément de vitesse pour le cas c3 (Newtonien)



FIGURE 7.6: Incrément de vitesse pour le cas a2 (Non Newtonien)


FIGURE 7.7: Incrément de vitesse pour le cas a3 (Non Newtonien)

178



FIGURE 7.8: Incrément de vitesse pour le cas a4 (Non Newtonien)

179



FIGURE 7.9: Incrément de vitesse pour le cas a5 (Non Newtonien)

180

Bibliographie

- [1] Ghemical. http://www.bioinformatics.org/ghemical.
- [2] W. Kinzelbach A. Liberzon, M. Guala and A. Tsinober. On turbulent kinetic energy production and dissipation in dilute polymer solutions. *Phys. Fluids*, 18 :125101, 2006.
- [3] N. Balci, B. Thomases, M. Renardy, and C.R. Doering. Symmetric factorization of the conformation tensor in viscoelastic fluid models. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 166(11) :546 – 553, 2011.
- [4] R. Benzi, E. De Angelis, V. L'vov, and I. Procaccia. Identification and calculation of the universal asymptote for drag reduction by polymers in wall bounded turbulence. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :194502, 2005.
- [5] R. Benzi, E. S. C. Ching, and I. Procaccia. Drag reduction in homogeneous turbulence by scale-dependent effective viscosity. *Phys. Rev. E*, 70 :026304, Aug 2004.
- [6] R. Benzi, E. De Angelis, R. Govindarajan, and I. Procaccia. Shell model for drag reduction with polymer additives in homogeneous turbulence. *Phys. Rev. E*, 68 :016308, Jul 2003.
- [7] S. Berti, A. Bistagnino, G. Boffetta, A. Celani, and S. Musacchio. Twodimensional elastic turbulence. *Phys. Rev. E*, 77 :055306, 2008.
- [8] S. Berti and G. Boffetta. Elastic waves and transition to elastic turbulence in a two-dimensional viscoelastic kolmogorov flow. *Phys. Rev. E*, 82 :036314, 2010.
- [9] R B Bird and J M Wiest. Constitutive equations for polymeric liquids. Annu. Rev. Fluid. Mech., 27(1) :169–193, 1995.
- [10] R Byron Bird, RC Armstrong, and Ole Hassager. Dynamics of polymeric liquids. vol. 2 : Kinetic theory. 1987.
- [11] R.B. Bird, R.C. Armstrong, and O. Hassager. Dynamics of polymeric liquids. Vol1 1, 2nd Ed. : Fluid mechanics. John Wiley and Sons Inc., New York, NY, 1987.
- [12] D. Bonn, Y. Couder, P. H. J. van Dam, and S. Douady. From small scales to large scales in three-dimensional turbulence : The effect of diluted polymers. *Phys. Rev. E*, 47 :R28–R31, 1993.

- [13] J.G. Brasseur and P.K. Yeung. Large and small-scale coupling in homogeneous turbulence : Analysis of the navier-stokes equation in the asymptotic limit. *Eighth symposium of turbulence shear flows*, 1991.
- [14] T. Burghelea, E. Segre, and V. Steinberg. Elastic turbulence in von karman swirling flow between two disks. *Phys. Fluids*, 19(5) :053104, 2007.
- [15] C. M. Casciola and E. De Angelis. Energy transfer in turbulent polymer solutions. J. Fluid Mech., 581 :419–436, 2007.
- [16] Y. Hussaini & A. Quarteroni C.G. Canuto. Spectral Methods : Evolution to Complex Geometries and Applications to Fluid Dynamics. Scientific Computation. Springer London, 2007.
- [17] S. Chen, G. D. Doolen, R.H. Kraichnan, and Z.S. She. On statistical correlations between velocity increments and locally averaged dissipation in homogeneous turbulence. *Phys. of Fluids A*, 5(2):458–463, 1993.
- [18] X. Chen, H. Marschall, M. Schäfer, and D. Bothe. A comparison of stabilisation approaches for finite-volume simulation of viscoelastic fluid flow. Int. J. Comput. Fluid Dyn., 27(6-7) :229–250, 2013.
- [19] E. De Angelis, C. M. Casciola, and R. Piva. Energy spectra in viscoelastic turbulence. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 241(3) :297 – 303, 2012. Special Issue on Small Scale Turbulence.
- [20] P.G. De Gennes. Scaling concepts in Polymer physics. Cornell University Press, 1979.
- [21] P.G. De Gennes. Towards a scaling theory of drag reduction. Physica A : Statistical Mechanics and its Applications, 140(1-2) :9 - 25, 1986.
- [22] P.G. De Gennes. Introduction to Polymer Dynamics. Cambridge University Press, 1990.
- [23] J Andrzej Domaradzki and Robert S Rogallo. Local energy transfer and nonlocal interactions in homogeneous, isotropic turbulence. *Physics of Fluids* A : Fluid Dynamics (1989-1993), 2(3) :413–426, 1990.
- [24] Wai-Sun Don and David Gottlieb. Spectral simulations of an unsteady compressible flow past a circular cylinder. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 80(1):39 – 58, 1990.
- [25] Y. Dubief, V. E. Terrapon, and J. Soria. On the mechanism of elasto-inertial turbulence. *Physics of Fluids*, 25(11), 2013.
- [26] Y. Dubief, V.E. Terrapon, C. White, E. Shaqfeh, P. Moin, and S. Lele. On the coherent drag-reducing turbulence enhancing behaviour of polymers in wall flows. J. Fluid Mech, 2004.
- [27] Y. Dubief, V.E. Terrapon, C. White, E. Shaqfeh, P. Moin, and S. Lele. New answers on the interaction between polymers and vortices in turbulent flows. *Flow Turbul. Combust.*, 2005.
- [28] R. Fattal and R. Kupferman. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high weissenberg number using the log-conformation representation. J. Non Newtonian Fluid Mech., 126(1):23–37, 2005.

- [29] P. J. Flory. *Principles of polymer chemistry*. Cornell University Press, 1953.
- [30] M.Y. Forestier, R. Pasquetti, R. Peyret, and C. Sabbah. Spatial development of wakes using a spectral multi-domain method. *Applied Numerical Mathematics*, 33(1):207 – 216, 2000.
- [31] A. Fouxon and V. Lebedev. Spectra of turbulence in dilute polymer solutions. *Phys. Fluids*, 15(7) :2060–2072, 2003.
- [32] J. Fröhlich and R. Peyret. Direct spectral methods for the low mach number equations. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2(3):195–213, 1992.
- [33] A. Groisman and V. Steinberg. Elastic turbulence in a polymer solution flow. *Nature*, 405(6782) :53–55, 2000.
- [34] A. Groisman and V. Steinberg. Efficient mixing at low reynolds numbers using polymer additives. *Nature*, 410, 2001.
- [35] A. Gupta, P. Perlekar, and R. Pandit. Two-dimensional homogeneous isotropic fluid turbulence with polymer additives. *Phys. Rev. E*, 91 :033013, 2015.
- [36] T. Y. Hou and R. Li. Computing nearly singular solutions using pseudospectral methods. *Journal of Computational Physics*, 226(1):379-397, 2007.
- [37] R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T Kitayama, and W. V. Metanomski. *Glossary of Basic Terms in Polymer Science*. 1996.
- [38] K. Kim, C.-F. Li, R. Sureshkumar, S. Balachandar, and R. J. Adrian. Effects of polymer stresses on eddy structures in drag-reduced turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 584 :281–299, 8 2007.
- [39] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140 :A1133–A1138, Nov 1965.
- [40] Fang L., Cui G.X., Xu C.X., and Zhang Z.S. Multi-scale analysis of energy transfer in scalar turbulence. *Chinese Physics Letters*, 22(11) :2877, 2005.
- [41] M. Lesieur. *Turbulence in Fluids*. Kluwer academic publishers, 1990.
- [42] Y. Liu, Y. Jun, and V. Steinberg. Concentration dependence of the longest relaxation times of dilute and semi-dilute polymer solutions. *Journal of Rheology*, 53(5) :1069–1085, 2009.
- [43] J. Lumley. Drag reduction by additives. Annu. Rev. Fluid. Mech., 1 :367, 1969.
- [44] R. Marino, P. D. Mininni, D. Rosenberg, and A. Pouquet. Emergence of helicity in rotating stratified turbulence. *Phys. Rev. E*, 87:033016, Mar 2013.
- [45] J. Mathieu and J. Scott. An Introduction to Turbulent Flow. 1996.
- [46] D.S. McKenzie. Polymers and scaling. *Physics Reports*, 27(2):35-88, 1976.
- [47] P. D. Mininni, A. Alexakis, and A. Pouquet. Scale interactions and scaling laws in rotating flows at moderate rossby numbers and large reynolds numbers. *Physics of Fluids (1994-present)*, 21(1) :015108, 2009.
- [48] P. D. Mininni and A. Pouquet. Helicity cascades in rotating turbulence. Phys. Rev. E, 79 :026304, Feb 2009.

- [49] P. D. Mininni, D. Rosenberg, and A. Pouquet. Isotropization at small scales of rotating helically driven turbulence. J. of Fluid Mech., 699 :263–279, 2012.
- [50] A.S. Monin and A.M. Yaglom. Statistical Fluid Mechanics, Volume I: Mechanics of Turbulence. Dover Books on Physics. Dover Publications, 1975.
- [51] A.S. Monin and A.M. Yaglom. Statistical Fluid Mechanics, Volume II: Mechanics of Turbulence. Dover Books on Physics. Dover Publications, 1975.
- [52] W.J.C. Orr. Statistical treatment of polymer solutions at infinite dilution. Transactions of the Faraday Society, 43:12–27, 1947.
- [53] S. A. Orszag and G. S. Patterson. Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Phys. Rev. Lett.*, 28 :76–79, Jan 1972.
- [54] T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :441–466, 9 1987.
- [55] P. Perlekar, D. Mitra, and R. Pandit. Direct numerical simulations of statistically steady, homogeneous, isotropic fluid turbulence with polymer additives. *Phys. Rev. E*, 82 :066313, 2010.
- [56] A. Peterlin. Streaming birefringence of soft linear macromolecules with finite chain length. *Polymer*, 2 :257–264, 1961.
- [57] A. Peterlin. Hydrodynamics of macromolecules in a velocity field with longitudinal gradient. J. Polymer Sci. B : Polymer Lett., 4(4) :287–291, 1966.
- [58] R. Peyret. Spectral Methods for Incompressible Viscous Flow. 2002.
- [59] S. B. Pope. *Turbulent Flow.* 2000.
- [60] I. Procaccia, V. S. L'vov, and R. Benzi. Colloquium : Theory of drag reduction by polymers in wall-bounded turbulence. Rev. Mod. Phys., 80 :225–247, 2008.
- [61] P.K. Ptasinski, F.T.M. Nieuwstadt, B.H.A.A. van den Brule, and M.A. Hulsen. Experiments in turbulent pipe flow with polymer additives at maximum drag reduction. *Flow, Turbulence and Combustion*, 66(2) :159–182, 2001.
- [62] A. Robert, T. Vaithianathan, L. R. Collins, and J. G. Brasseur. Polymerladen homogeneous shear-driven turbulent flow : a model for polymer drag reduction. *Journal of Fluid Mechanics*, 657 :189–226, 8 2010.
- [63] R. S. Rogallo. An illiac program for the numerical simulation of homogeneous incompressible turbulence, 1977.
- [64] Y. Roiter and S. Minko. Afm single molecule experiments at the solid-liquid interface : in situ conformation of adsorbed flexible polyelectrolyte chains. *Journal of the American Chemical Society*, 2005.
- [65] P. E. Rouse Jr. A theory of the linear viscoelastic properties of dilute solutions of coiling polymers. *The Journal of Chemical Physics*, 21(7):1272–1280, 1953.
- [66] P. Sagaut and C. Cambon. *Homogeneous turbulence dynamics*. Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [67] D Samanta, Y. Dubief, Holzner M., C. Schäfer, A. N. Morozov, C. Wagner, and B. Hof. Elasto-inertial turbulence. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 110 :10557– 10562, 2013.

- [68] J. Shi and L. R. Collins. Dynamics of dissolved polymer chains in isotropic turbulence. New J. Phys. 9, 360, 2007.
- [69] S. Simoëns. Thèse doctorat : Applications de l'analyse d'images à des phénomènes de mélange et de dispersion turbulents., 1992.
- [70] C. Staquet and J. J. Riley. A Numerical Study of a Stably-Stratified Mixing Layer, pages 381–397. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1989.
- [71] R. Sureshkumar and N. Beris. Effect of artificial stress diffusivity on the stability of numerical calculations and the flow dynamics of time-dependent viscoelastic flows. J. of Non-Newtonian Fluid Mech., 60(1):53 – 80, 1995.
- [72] M. Tabor and P. G. de Gennes. A cascade theory of drag reduction. EPL (Europhysics Letters), 2(7) :519, 1986.
- [73] V. E. Terrapon, Y. Dubief, P. Moin, E. S. G. Shaqeh, and S. K. Lele. Simulated polymer stretch in a turbulent flow using brownian dynamics. *Journa of Fluid Mechanics*, 504 :61–71, 4 2004.
- [74] V. E. Terrapon, Y. Dubief, and J. Soria. On the role of pressure in elastoinertial turbulence. J. Turbul., 16 :26–43, 2015.
- [75] L. Thais, G. Mompean, and T.B. Gatski. Spectral analysis of turbulent viscoelastic and newtonian channel flows. J. Non-Newtonian Fluid Mech., 200 :165– 176, 2013.
- [76] B. A. Toms. Some observation on the flow of linear polymer solutions through straight tubes at large Reynolds numbers. In Proc. 1st Intl. Congr. on Rheology, volume Vol. II, pages 135–141, 1948.
- [77] T. Vaithianathan and L. R. Collins. Numerical approach to simulating turbulent flow of a viscoelastic polymer solution. J. Comput. Phys., 187(1) :1 – 21, 2003.
- [78] T. Vaithianathan, A. Robert, J. G. Brasseur, and L. R. Collins. An improved algorithm for simulating three-dimensional, viscoelastic turbulence. J. non-Newtonian fluid mech., 140(1):3–22, 2006.
- [79] T. Vaithianathan, A. Robert, J. G. Brasseur, and L. R. Collins. Polymer mixing in shear-driven turbulence. J. Fluid Mech., 585 :487–497, 2007.
- [80] P. C. Valente, C. B. da Silva, and F. T. Pinho. The effect of viscoelasticity on the turbulent kinetic energy cascade. J. Fluid Mech., 760 :39–62, 2014.
- [81] P. S. Virk. Drag reduction fundamentals. AIChE J., 21, 1975.
- [82] P. S. Virk, D. C. Sherman, and D. L. Wagger. Additive equivalence during turbulent drag reduction. AIChE J., 43, 1997.
- [83] F. Waleffe. The nature of triad interactions in homogeneous turbulence. Physics of Fluids A, 4(2):350–363, 1992.
- [84] D. M. Warholic, H. Massah, and J. T. Hanratty. Influence of drag-reducing polymers on turbulence : effects of reynolds number, concentration and mixing. *Experiments in Fluids*, 27(5) :461–472, 1999.
- [85] H. R. Warner Jr. Kinetic theory and rheology of dilute suspensions of finitely extendible dumbbells. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 11(3):379–387, 1972.

- [86] T. Watanabe and T. Gotoh. Coil-stretch transition in an ensemble of polymers in isotropic turbulence. *Phys. Rev. E*, 81 :066301, 2010.
- [87] T. Watanabe and T. Gotoh. Hybrid eulerian-lagrangian simulations for polymer-turbulence interactions. J. Fluid Mech., 717:535-575, 2013.
- [88] T. Watanabe and T. Gotoh. Power-law spectra formed by stretching polymers in decaying isotropic turbulence. *Phys. Fluids*, 26(3), 2014.
- [89] C. M. White and M. G. Mungal. Mechanics and prediction of turbulent drag reduction with polymer additives. Annu. Rev. Fluid. Mech., 40(1) :235–256, 2008.
- [90] H.D. Xi, E. Bodenschatz, and H. Xu. Elastic energy flux by flexible polymers in fluid turbulence. *Phys. Rev. Lett.*, 111 :024501, 2013.
- [91] B. H. Zimm. Dynamics of polymer molecules in dilute solution : viscoelasticity, flow birefringence and dielectric loss. *The journal of chemical physics*, 24(2) :269–278, 1956.