

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N° d'ordre :

N° de série :

THÈSE

Présentée pour obtenir le diplôme de
Doctorat en Sciences Physiques
Option : Energétique

THEME

**COUCHES LIMITES HYPERSONIQUES DANS DES ECOULEMENTS
VISQUEUX EN DESEQUILIBRE CHIMIQUE**

Présenté par :

BOULAHIA Allaoua

Soutenue le :/...../.....

Devant le jury :

Président	: Mr. L. BAHY	Prof.	Université MENTOURI, Constantine
Rapporteur	: Mr. M. AFRID	Prof.	Université MENTOURI, Constantine
Examineurs :	Mrs. R. DIZENE	Prof.	Université U.S.T.H.B, Alger
	L. ADJLOUT	Prof.	Université U.S.T.O, Oran
	Z. NEMOUCHI	Prof.	Université MENTOURI, Constantine
	B. BENKOUSSAS	M. C. A.	E.N.S.P, Alger

Dédicaces

.....A ma femme
..... A mes enfants

Remerciements

Arrivant au terme de ce travail, je souhaiterais exprimer toute ma reconnaissance et mes remerciements à tous ceux qui m'ont accompagné dans cette aventure.

Mes remerciements s'adressent tout d'abord au professeur Mohamed AFRID qui n'a pas hésité une seconde à m'accorder sa confiance ; cette confiance n'a jamais failli depuis . Mohamed a su comprendre que le bon achèvement de ce travail impliquait que le sujet me passionne, et il a fait preuve de flexibilité pour qu'il soit ainsi. Pour cela, mais aussi pour le chaleureux accompagnement qu'il m'a offert, je lui exprime toute ma gratitude.

Je tiens aussi à remercier très chaleureusement les professeurs Rabah Dizene, Lahouari Adjlout , Lakhdar Bahi , Zoubir Nemouchi ainsi que le Dr. Bouzid Benkoussas et le Dr. Smain Benissaad d'avoir accepté d'être membres de jury et qui en cette qualité ont consacré de leur temps à lire ce document avec une grande attention .

Mes remerciements s'adressent aussi à Messieurs Dr. Said Abboudi et Prof. Jean Claude Imbert de l'Université de Technologie, Belfort – Montbéliard qui m'ont donné la possibilité de finaliser ce travail. Leurs nombreux conseils, leur esprit critiques et leur sens de la précision m'ont été précieux. Je leur suis très redevable.

Mes vives remerciements s'adressent aussi à tous ceux qui m'ont apporté leurs conseils et fait partager leurs points de vue et connaissances.

C'est certainement à ma femme bien aimée, mes perles rares, Félicia et Nourhene et mon benjamin Adam Abdelmoumene que je suis le plus redevable. Elles ont su faire preuve d'une patience infinie. Et tous mes remerciements n'y suffiraient pas.

Table des Matières

Listes des figures	VI
Liste des tableaux	XI
Nomenclature	XII
INTRODUCTION GENERALE	1
Part I : MODELISATION ET SIMULATION	10
1. Introduction	11
1.1. Domaine de validité des équations de Navier – Stokes.....	11
1.2. Phénomènes liés au déséquilibre	13
1.3. Autres caractéristiques de l'écoulement	15
1.4. Spécificité de la modélisation a retenir.....	16
2. Equations de l'Aérodthermochimie	18
2.1. Equations de bilan	18
3. Représentation thermodynamique	20
3.1. Définitions	20
3.2. Modes de stockage de l'énergie des molécules	20
3.3. Mécanique statistique	22
3.3.1. Contribution de la translation	23
3.3.2. Contribution de la rotation.....	24
3.3.3. Contribution de la vibration.....	24
3.3.4. Contribution de l'excitation électronique.....	25
3.3.5. Autres contributions	26
3.4. Relation entre l'énergie et la température.....	26
3.5. Equation de l'état.....	28
4. Termes de diffusion	29
4.1. Flux de diffusion massique.....	29
4.2. Tenseur des contraintes visqueuses	30

4.3.	Flux de chaleur	30
4.3.1.	Nombre sans dimension	31
4.4.	Coefficient de transport	32
4.4.1.	Viscosité	32
4.4.2.	Conductivité	33
5.	Cinétique chimique	36
5.1.	Présentation	36
5.2.	Modèle chimique pour l'air	38
5.2.1.	Détermination des vitesses de réaction.....	39
5.2.2.	Forme générale des taux de production.....	40
5.3.	Calcul de l'équilibre chimique	41
6.	Conditions aux limites à la paroi	43
6.1.	Conditions pour la vitesse, la pression et la température	43
6.2.	Catalyse	45
6.2.1.	Catalycité.....	45
6.2.2.	Conditions à la paroi pour les concentrations.....	46
7.	Equations Finales	47
7.1.	Ecoulement bidimensionnel plan et axisymétrique	47
7.2.	Grandeurs caractéristiques de l'écoulement	50
7.2.1.	Temps caractéristiques	50
7.2.2.	Equations sans dimension.....	52
7.3	Equations en coordonnées curvilignes	53
7.4.	Hypothèse de couche mince	54
7.4.1	Introduction	54
7.4.2.	Jeu final d'équations.....	55
Part II : FORMULATION NUMERIQUE		56
8.	Introduction	57
8.1.	Méthode des volumes finis	57
8.2.	Détermination des flux aux interfaces	59
9.	Rappels sur les lois de Conservation hyperbolique	62
9.1.	Solutions faibles	62
9.2.	Notion d'Entropie	66
9.2.1.	Condition entropique	66
9.2.2.	Méthode de viscosité	67
9.2.3.	Théorème d'existence et d'unicité.....	68
10.	Schémas TVD pour une équation de conservation scalaire	69
10.1	Concepts de base sur les schémas Numériques	70
10.1.1.	Définitions	70
10.1.2.	Exemples de schémas numériques à trois points.....	74
10.2.	Schémas monotones et TVD	79

10.2.1. Définitions et propriétés	79
10.2.2. Consistance avec la condition d'entropie	81
10.3. Schémas TVD du deuxième ordre	84
10.3.1. Flux modifié de Harten.....	86
10.3.2. Limiteurs de flux	88
10.4. Schémas TVD implicites	92
10.4.1. Propriété TVD	92
10.4.2. Linéarisation	93
10.5. Equation de conservation scalaire avec terme source.....	95
10.5.1. Etude d'une équation avec terme source	96
10.5.2. Stabilité.....	98
11. Extension à un système hyperbolique non linéaire	100
11.1. Introduction	100
11.2. Cas d'un système à coefficients constants.....	103
11.3. Cas général : Système local de directions Caractéristiques.....	105
11.4. Formulation implicite	106
12. Equations d'Euler	107
12.1 Equations d'Euler en coordonnées cartésiennes.....	109
12.1.1 Moyenne de Roe pour un mélange de gaz.....	112
12.1.2 Formulation implicite	116
12.1.3. Conservation des proportions locales d'atomes	118
12.2 Equation d'Euler en coordonnées curvilignes	119
12.2.1 Equations	119
12.2.2 Valeurs propres et vecteurs propres	121
12.2.3 Formulation implicite	122
13. Résolution des équations de Navier - Stokes avec termes sources	123
13.1 Discrétisation des équations	125
13.1.1 Termes de convection.....	125
13.1.2 Termes de diffusion.....	127
13.1.3 Termes sources	127
13.1.4 Conditions aux limites	128
13.1.5. Système discrétisé final	130
13.2. Résolution du système final.....	131
13.2.1. Procédure de relaxation	131
13.1.5. Calcul du pas de temps	132
13.1.6. Initialisation de la solution	132
Part III : RESULTATS ET INTERPRETATIONS	133
14. Introduction	134
15. Application des schémas TVD : Etude du tube à choc	136
15.1. Procédure numérique.....	136

15.1.1. Mélange de gaz non réactifs	138
15.1.2. Mélange de gaz réactif.....	147
16. Tests de validation du code	170
16.1. Ecoulement autour d'une double ellipse	170
16.1.1. Présentation	170
16.1.2. Analyse de l'écoulement	170
16.2. Ecoulement autour d'une sphère – cylindre	181
16.3. Ecoulement sur une plaque plane	190
16.3.1. Etude de la relaxation le long de la plaque.....	191
16.3.2. Etude de la couche limite.....	197
17. Ecoulement autour d'un hyperboloïde	205
17.1. Résultats en rapport avec le nombre de Mach.....	210
17.2. Influence du modèle thermodynamique	224
17.3. Influence des représentations chimiques	228
17.4. Influence du modèle de diffusion	234
18. Convergence	238
18.1. Aspect informatique	238
18.2. Convergence	239
18.2.2. Description des procédures utilisées.....	239
18.2.3. Application à un écoulement réactif.....	240
 CONCLUSION	 245
 ANNEXES	 249
 Annexe A	 250
Définitions des diverses constantes	
A.1 Constituants de l'air.....	250
A.2. Pour les termes de diffusion	251
A.3. Pour les taux de production	251
A.4. Trajectoire de rentrée STS-2 et corps axisymétrique équivalent:.....	256
 Annexe B	 2577
Calcul de l'équilibre chimique pour l'air	
 Annexe C	 259
Traitement des équations	
C.1 Equations sans dimension.....	259
C.1.1. Equation d'état.....	259
C.1.2. Termes de diffusion	260
C.1.3. Termes sources.....	261
C.2. Coordonnées curvilignes.....	262
C.3. Hypothèse de couche mince.....	264

Annexe D	266
Le problème de Riemann pour équation scalaire	
D.1. Remarques préliminaires	266
D.2. Solution du problème de Riemann.....	267
D.3. Forme générale de la solution.....	269
Annexe E	270
Dérivées de la température et de la pression	
Annexe F	271
Matrices pour les équations d'Euler	
F.1. Matrices jacobienne et Vecteurs propres	271
F.2 . Moyenne de Roe.....	274
F.3. Discrétisation implicite en coordonnées.....	276
F.4. Équations d'Euler pour un mélange réactif.....	277
Annexes G	279
Matrices pour les équations de Navier – Stokes	
G.1. Vecteurs et matrices jacobienne pour les termes visqueux.....	279
G.3. Vecteurs et matrices jacobienne pour les termes sources	283
G.4. Discrétisation implicite.....	284

Liste des figures

Figure 0.1 : Récapitulation des caractéristiques des écoulements hypersoniques.....	4
Figure 1.2: Influence de l'altitude sur la modélisation du milieu rencontré.....	12
Figure 1.3 relation entre le nombre de Knudsen et la modélisation de l'écoulement ..	13
Figure 1.4: Distribution de la vitesse à travers une onde de choc normale	15
Figure 3 1: schématisation du mouvement interne des molécules diatomiques.....	21
Figure 8 1: maillage volumes finies	58
Figure 9.1: Intersection de caractéristiques.....	64
Figure 9.2 : Domaine admettant une discontinuité.....	64
Figure 9.3: Droites caractéristiques pour l'équation de Burgers.....	65
Figure 9.4 : Discontinuité admissibles	66
Figure 10.1: Discrétisation en espace et temps	70
Figure 10.2 : Cônes de dépendance physique et numérique.....	74
Figure 10.3 : Schéma décentré	76
Figure 10.4: Approximation de $ x $	84
Figure 10.5 : Domaine où le schéma est TVD	90
Figure 10.6 : Représentation des différents limiteurs.....	91
Figure 10 7: Propagation d'une onde de choc	97
Figure 12.1: Discrétisation en 2D cartésien	110
Figure 12.2: Moyenne à l'interface définie par Glatser	114
Figure 13.1: Frontières du domaine de calcul, configurations : axisymétrique (a), plane symétrique (b) et plane non symétrique (c)	129
Figure 13.2: Représentation simplifiée du système final	130
Figure 15.1: Tube à choc : mélange de gaz inertes	139
Figure 15.2 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma symétrique et limiteurs (11.19) et (11.20).....	142

Figure 15.3: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma symétrique et limiteur (11.21).	143
Figure 15.4: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.14).	143
Figure 15.5 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.15) et (11.16).....	144
Figure 15.6: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.17) et (11.18).....	145
Figure 15.7 : Tube à choc : Zones d'écoulements et localisation des perturbations	148
Figure 15.8 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) schéma symétrique et limiteur (11.20).	149
Figure 15.9 : Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma symétrique Et limiteur (11.21)	153
Figure 15.10: Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma décentré upwind et limiteur (11.16).....	157
Figure 15.11 : Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma décentré upwind et limiteur (11.18).....	161
Figure 15.12 : mélangez de gaz réactifs, maillage à 201 points.....	166
Figure 16.1: Définition de la géométrie de la double ellipse.....	171
Figure 16.2: Lignes Iso température autour de la double ellipse	172
Figure 16.3 : Lignes Iso nombre de Mach autour de la double ellipse.....	172
Figure 16.4: Lignes Iso Coefficient de pression autour de la double ellipse	173
Figure 16.5: Profil de température le long de l'axe de la double ellipse à $M_\infty = 25$	173
Figure 16.6: Ligne Iso fraction massique d'azote autour de la double ellipse	174
Figure 16.7: Ligne Iso fraction massique d'oxygène autour de la double ellipse	174
Figure 16.8: Ligne Iso fraction massique de NO autour de la double ellipse	175
Figure 16.9: Profils de fraction massique le long de l'axe de la double ellipse à $M_\infty = 25$	175
Figure 16.10: Coefficient de pression le long de la paroi de la double ellipse à $M_\infty = 25$	177
Figure 16.11: Coefficient de frottement le long de la paroi de la double ellipse	178
Figure 16.12: Coefficient de Stanton le long de la paroi de la double ellipse.....	178
Figure 16.13 : Maillage A sur la double ellipse.....	179
Figure 16.14 : Comparaison des coefficients de Frottement pariétaux sur la double ellipse.....	180
Figure 16.15 : Comparaison des coefficients de Stanton pariétaux sur la double ellipse.....	180
Figure 16.16: structure du maillage (79 x 60 points)	182

Figure 16.17 : lignes iso température autour de la sphère à $M_\infty=15.3$	183
Figure 16.18: lignes iso masse volumique autour de la sphère à $M_\infty=15.3$	184
Figure 16.19: lignes iso fraction massique d'azote autour de la sphère à $M_\infty=15.3$	184
Figure 16.20: lignes iso fraction massique d'oxygène autour de la sphère à $M_\infty=15.3$	185
Figure 16.21 : lignes iso fraction massique de monoxyde d'azote autour de la sphère à $M_\infty=15.3$	185
Figure 16.22 : distance de détachement	187
Figure 16.23 : Profil de température le long de l'axe de la sphère à $M_\infty=15.3$	187
Figure 16.24: ligne des fractions massiques le long de l'axe de la sphère à $M_\infty=15.3$	188
Figure 16.25 : Profil de température à $\phi = 30^\circ$ et 40° , $M_\infty=15.3$	188
Figure 16.26 : Profil des fractions massiques à $\phi = 30^\circ$, $M_\infty=15.3$	189
Figure 16.27 : Profil des fractions massiques à $\phi = 45^\circ$, $M_\infty=15.3$	189
Figure 16.28 : Pression le long de la plaque.....	193
Figure 16.29 : Température le long de la plaque.....	193
Figure 16.30 : Vitesse le long de la plaque	194
Figure 16.31 : Fraction massique d'azote moléculaire le long de la plaque	194
Figure 16.32 : Fraction massique de l'oxygène moléculaire le long de la plaque	195
Figure 16.33 : Fraction massique du monoxyde d'azote le long de la plaque	195
Figure 16.34 : Fraction massique d'azote atomique le long de la plaque	196
Figure 16.35 : Fraction massique d'azote atomique le long de la plaque	196
Figure 16.36 : Profil de température à $x = 0.1$ m , cas 1.....	198
Figure 16.37 : Profil de température à $x = 0.8$ m , cas 1.....	198
Figure 16.38: Profil de température à $x = 0.1$ m , cas 2.....	199
Figure 16.39 : Profil de température à $x = 0.8$ m , cas 2.....	199
Figure 16.40 : Profil de température à $x = 0.1$ m , cas 3.....	200
Figure 16.41 : Profil de température à $x = 0.8$ m , cas 3.....	200
Figure 16.42 : Profil de fraction massique à $x = 0.1$ m, cas 1	201
Figure 16.43 : Profil de fraction massique à $x = 0.8$ m, cas 1	201
Figure 16.44 : Profil de fraction massique à $x = 0.1$ m, cas 2	202
Figure 16.45 : Profil de fraction massique à $x = 0.8$ m, cas 2	202
Figure 16.46 : Profil de fraction massique à $x = 0.1$ m, cas 3	203
Figure 16.47 : Profil de fraction massique à $x = 0.8$ m, cas 3	203
Figure 16.48 : Flux de chaleur à la paroi ; Cas 1 , 2 et 3.....	204

Figure 17.1 : Configuration Hyperboloïde	206
Figure 17.2 : Evolution de l'écoulement en fonction de l'altitude.....	207
Figure 17.3 : Profil du Maillage à 130 x 70 points.....	209
Figure 17.4 : Hyperboloïde ; profils de pression en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	214
Figure 17.5 : Hyperboloïde ; profils de température en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	215
Figure 17.6: Hyperboloïde ; profils de la fraction massique de l'Azote moléculaire en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	216
Figure 17.7 : Hyperboloïde ; profils de la fraction massique de l'oxygène moléculaire en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	217
Figure 17.8 : Hyperboloïde ; profils de la fraction massique de l'Azote atomique en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	218
Figure 17.9: Hyperboloïde ; profils de la fraction massique du monoxyde d'azote en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$	219
Figure 17.10: Hyperboloïde ; profils en $x = 2$ m , paroi catalytique , $M_\infty = 25.5$	220
Figure 17.11 : profil de température sur l'axe, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	222
Figure 17.12 : profil de fractions massiques sur l'axe, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	222
Figure 17.13 : Coefficient de Stanton à la paroi, Hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$ et 25.5	223
Figure 17.14: Profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$ et 25.5.....	225
Figure 17.15: Profils de fractions massiques la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 25$	226
Figure 17.16: Profils de fractions massiques la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	226
Figure 17.17: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	227
Figure 17.18: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$	227
Figure 17.19: profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	229
Figure 17.20: profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$	229
Figure 17.21: profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$	230
Figure 17.22: profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$	231

Figure 17.23: profils de fraction massique de monoxyde d'azote sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$...	232
Figure 17.24: profils de fraction massique de monoxyde d'azote sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$...	232
Figure 17.25: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$	233
Figure 17.26: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 9.15$	233
Figure 17.27 : Profils de température sur la ligne de symétrie : influence des modèles de diffusion, hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$	236
Figure 17.28 : Profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence des modèles de diffusion, hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$	236
Figure 17.29 : Profils de vitesse tangentielle en $x = 30$ cm : influence des modèles de diffusion , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$	237
Figure 17.30 : Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$	237
Figure 18. 1 : Convergence : pas de temps local, hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$	242
Figure 18. 2 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps local, Hyperboloïde	242
Figure 18. 3 : Convergence : pas de temps uniforme, hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$	243
Figure 18. 4 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps uniforme, Hyperboloïde	243
Figure 18. 5: Convergence : pas de temps uniforme, hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$	244
Figure 18. 6 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps uniforme, Hyperboloïde	244

Liste des Tableaux

Tableau 1.1 : Rentrée atmosphérique : Différents Milieux Rencontrés	11
Tableau 15.1 : Conditions de calcul (mélange gaz inerte)	138
Tableau 15.2 : Conditions de calcul pour le tube à choc : mélange de gaz réactifs	148
Tableau 16.1 : Conditions de calcul pour la double ellipse.....	170
Tableau 16.2: caractéristiques des différents maillages	177
Tableau 16.3: Conditions de calcul pour la sphère à $M_\infty=15.3$	181
Tableau 16.4: caractéristiques du maillage pour la sphère à $M_\infty=15.3$	181
Tableau 16.5 : hypothèses principales des modèles utilisés.....	183
Tableau 16.6: Conditions de calcul pour une plaque plane.....	190
Tableau 16.7: Caractéristiques des maillages pour la plaque plane	190
Tableau 17.1: Conditions à l'infini amont pour l'hyperboloïde Début de la rentrée atmosphérique Cas 1.....	208
Tableau 17.2: Conditions à l'infini amont pour l'hyperboloïde Fin de la rentrée atmosphérique, Cas 2.....	208
Tableau 17.3 : Caractéristiques des maillages utilisées.....	210
Tableau 17.4 : Modélisation choisie.....	210
Tableau 17.5: Modélisation choisie pour l'étude de l'influence du modèle thermodynamique de l'équation d'état.....	224
Tableau 17.6 : Modélisation choisie pour l'étude de l'influence du modèle chimique	228
Tableau 17.7: Modélisation choisie pour la comparaison des modèles de diffusion ..	235

Nomenclature

Alphabet latin

a_f	Vitesse du son à l'état figé
$a_{k,I}$	Coefficients des polynômes formant l'équation d'état
a_x^l	Valeurs propres de A_x
a_y^l	Valeurs propres de A_y
A_I^μ	Coefficients de la loi de viscosité de Blottner
A_c	Coefficient de la constante de formation directe
A_k^c	Coefficients de la constante d'équilibre
A_x	Matrice jacobienne du flux convectif F
A_y	Matrice jacobienne du flux convectif G
B_c	Coefficient de la constante de formation directe
B_I^μ	Coefficients de la loi de viscosité de Blottner
C_I	Fraction massique de l'espèce I : $C_I = \rho_I / \rho$
C_I^μ	Coefficients de la loi de viscosité de Blottner
C_{P_f}	Capacité calorifique à pression constante du mélange figé
C_{P_I}	Capacité calorifique à pression constante de l'espèce I
C_{V_I}	Capacité calorifique à volume constant de l'espèce I
D_{12}	Coefficient de diffusion binaire
D_{IK}	Coefficient de diffusion polynaire
e	Énergie interne du mélange (J/kg)
e_I	Énergie interne de l'espèce I (J/kg)
e_I^0	Énergie de formation à 0°K de l'espèce I (J/kg)
E	Énergie totale du mélange (J/kg)
f	Fonction scalaire hyperbolique
F	Flux convectif dans la direction x
F_V	Flux diffusif dans la direction x
g_x	Limiteur pour le schéma décentré dans la direction x

NOMENCLATURE

G	Flux convectif dans la direction y
G_V	Flux diffusif dans la direction y
h_I	Enthalpie de l'espèce I (J/kg)
H_V	Vecteur pour la diffusion
H	Enthalpie totale (J/kg)
k	Constante de Boltzmann, k
K_{eq}	constante d'équilibre
K_d	Constante de vitesse de réaction directe
K_i	Constante de vitesse de réaction inverse
Kn	Nombre de Knudsen
L	Longueur de référence
Le	Nombre de Lewis
M_I	Masse molaire de l'espèce I (kg/mol)
M_∞	Nombre de Mach à l'infini amont
n_I	Nombre de mole par unité de volume, $n_I = \rho_I / M_I$
n_s	Nombre total d'espèce prise en compte
\mathbf{N}	Nombre d'Avogadro, $\mathbf{N} = 6.02217 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
$\mathcal{N}_{i,j+1/2}$	Terme générique pour la métrie à l'interface ($i,j + 1/2$)
P	Pression totale de l'écoulement
\mathcal{P}	Vecteur des termes de pression en axisymétrique
P_I	Pression partielle de l'espèce I
Pr	Nombre de Prandtl
q	Variable : Newton – Raphson
Q	Fonction de partition
Q_I	Flux de diffusion massique
\tilde{Q}_x	Limiteurs pour les schémas centrés
Re	Nombre de Reynolds
R	Constante universelle des gaz, $R = 8.31434 \text{ J/mol/}^\circ\text{K}$
R_I	Constante de l'espèce I , $R_I = R/M_I \text{ J/kg/}^\circ\text{K}$
R_N	Rayon du nez du corps
R_x	Matrices des vecteurs propres à droite de A_x
R_y	Matrices des vecteurs propres à droite de A_y
S	Vecteur des termes sources
S_{V_1}	Vecteur des termes visqueux (l'approximation de couche mince)
S_{V_3}	Vecteur supplémentaire de termes visqueux

t	temps (s)
T	Température (°K)
u	Composante de la vitesse selon l'axe x
u_{D_i}	Composante de la vitesse de diffusion selon l'axe x
U	Vecteur des variables conservatives
U_∞	Vitesse à l'infini amont
v	Composante de la vitesse selon l'axe y
v_{D_i}	Composante de la vitesse de diffusion selon l'axe y
x	Première direction d'espace (coordonnées cartésiennes)
y	deuxième direction d'espace (coordonnées cartésiennes)

Alphabet grec

γ_I	Fraction molaire de l'espèce I
γ	Rapport des chaleurs spécifiques, $\gamma = C_p/C_v$
δ	Paramètre de la fonction de correction entropique
η	Direction normale (coordonnées curviligne)
θ_c	Température caractéristique de la dissociation
θ_r	Température caractéristique de la rotation
θ_v	Température caractéristique de la vibration
κ	Dérivée de la pression par rapport à l'énergie (ρ_I constant)
ε_i	Niveau d'énergie ou nombre moyen de particules
λ	Libre parcours moyen ou conductivité du mélange
λ_I	Conductivité de l'espèce I
μ	Viscosité du mélange
μ_I	Viscosité de l'espèce I
ξ	Direction longitudinale (coordonnées curvilignes)
ρ	Masse volumique du mélange (kg/m^3)
ρ_I	Masse volumique de l'espèce I (kg/m^3)
τ	Temps de relaxation
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
Φ	Flux de chaleur
χ_I	Dérivée de pression par rapport à ρ_I (à ρ_e constant)

NOMENCLATURE

$\psi(z)$	Fonction de correction entropique du schéma de Roe
ω_I	Taux de production de l'espèce I
α_x	Paramètre égale à $R_{x_{i+1/2j}}^{-1} (U_{i+1,j} + U_{i,j})$
σ	Paramètre égale à $1/2\psi(x)$
ϕ	Fonction de dissipation
Δ	Difference entre deux éléments
Δ_i	Paramètre égale à $(u_{i+1} - u_i)$

Indices et exposants

eq	Grandeur à l'équilibre chimique
i	Indice d'un point du maillage dans la direction longitudinale
$i + 1/2$	Interface entre les points i et $i + 1$
I	Espèce
j	Indice d'un point du maillage dans la direction transversale
$j + 1/2$	Interface entre les points j et $j + 1$
ref	Grandeur de référence
∞	Grandeur à l'infini
P	Grandeur à la paroi
n	Indice du pas de temps ou de l'itération
*	Grandeur avec dimension (chap. :7 et annexes C)

INTRODUCTION GENERALE

Aérodynamique Supersonique

Le développement des grands projets de lanceurs et de navettes spatiales (concepts Ariane V- hermès ou Sanger par exemple pour l'Europe ou la navette spatiale américaine) a entraîné un regain d'intérêt pour le domaine hypersonique. Une des contraintes majeures intervenant dans la conception d'un véhicule hypersonique est liée à l'échauffement de la paroi. Différentes causes sont à l'origine de cet échauffement. Parmi lesquelles nous pouvons citer :

- La dissipation visqueuse (chauffage des gaz par frottement) dans les couches limites
- Le rayonnement thermique à des températures de l'ordre de plusieurs milliers de ° K
- La présence d'ondes de chocs fortes au sein de l'écoulement
- La transition vers la turbulence et les instabilités (en particulier les instabilités de Götler) sur la paroi courbées
- Et les effets de la thermochimie

Dans cette étude, nous avons plus particulièrement porté notre attention sur les effets de thermochimie

Description des écoulements hypersonique

Au cours d'une rentrée atmosphérique, une onde de choc forte, détachée, entoure l'appareil. A travers cette onde de choc, l'air est brusquement ralenti et une grande part de l'énergie cinétique se transforme en énergie thermique. A titre d'illustration, considérons un véhicule se déplaçant à une vitesse U_∞ de 7000 m.s-1 à une altitude d'environ 70 Km (la température T_0 vaut alors 200 ° K) . En première approximation, en assimilant l'air à un gaz idéal dont la chaleur massique à pression constante est $C_p = 1000 \text{ J.Kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, l'enthalpie totale est donnée par :

$$H_\infty = C_p T_\infty + \frac{1}{2} U_\infty^2 \approx \frac{1}{2} U_\infty^2 \approx 2.5 \cdot 10^7 \text{ J.Kg}^{-1}$$

Au voisinage de la paroi, la vitesse est quasiment nulle et l'enthalpie totale H vaut alors :

$$H = C_p T$$

INTRODUCTION GENERALE

Par conservation de l'enthalpie totale ($H = H_0$), la température T au voisinage de la paroi est d'environ 25 000 °K. Bien que ce niveau de température soit largement au-delà de la limite de validité de l'hypothèse de gaz idéal, ce développement met en évidence l'une des caractéristique principale des écoulements hypersoniques : la température régnant dans l'écoulement est élevée. L'échauffement de la paroi sera sensible.

Les conséquences de hauts niveaux de température sont multiples ; on peut relever en particulier :

- Une modification des propriétés thermodynamiques de l'air due à l'excitation des degrés de liberté internes des particules : l'air ne peut plus être assimilé à un gaz idéal.
- L'apparition de réactions chimiques entre différents composants de l'air

Le retour à l'état d'équilibre (thermodynamique ou chimique) s'effectue par l'intermédiaire des collisions entre particules. On peut d'ores et déjà souligner que l'écoulement peut être localement en déséquilibre thermodynamique ou chimique. En effet, compte tenu des vitesses et des températures mises en jeu, l'ajustement vers l'état d'équilibre des propriétés thermodynamiques ou de la décomposition chimique, peut demander un temps similaire au temps de déplacement du fluide dans une zone donnée de l'écoulement. Ces phénomènes seront discutés et analysés de façon plus détaillée dans la suite de ce mémoire.

D'autre part, pour des nombres de Mach hypersonique, la couche de l'onde de choc (zone comprise entre l'onde de choc et la paroi de l'appareil) est mince, l'onde de choc étant collé à la paroi. Dans la région du nez, la courbure de l'onde de choc est très intense et conduit à la présence d'une couche entropique, siège de forts gradients d'entropie qui affecte le développement de la couche limite. Une conséquence des valeurs élevées du nombre de Mach, liée également aux valeurs faibles ou modérées des nombres de Reynolds Re des écoulements considérés, est l'existence de zones de fortes interactions visqueuses dues à l'épaississement de la couche limite et à la faible épaisseur de la couche de choc.

L'ensemble des effets mentionnés ci-dessus, caractéristiques des écoulements hypersoniques, est récapitulé sur la figure 01 et fait l'objet d'une étude plus détaillée dans la suite de ce mémoire. Pour une description très complète des écoulements hypersoniques et des modélisations applicables, on pourra utilement consulter les références [5, 9, 37, 86].

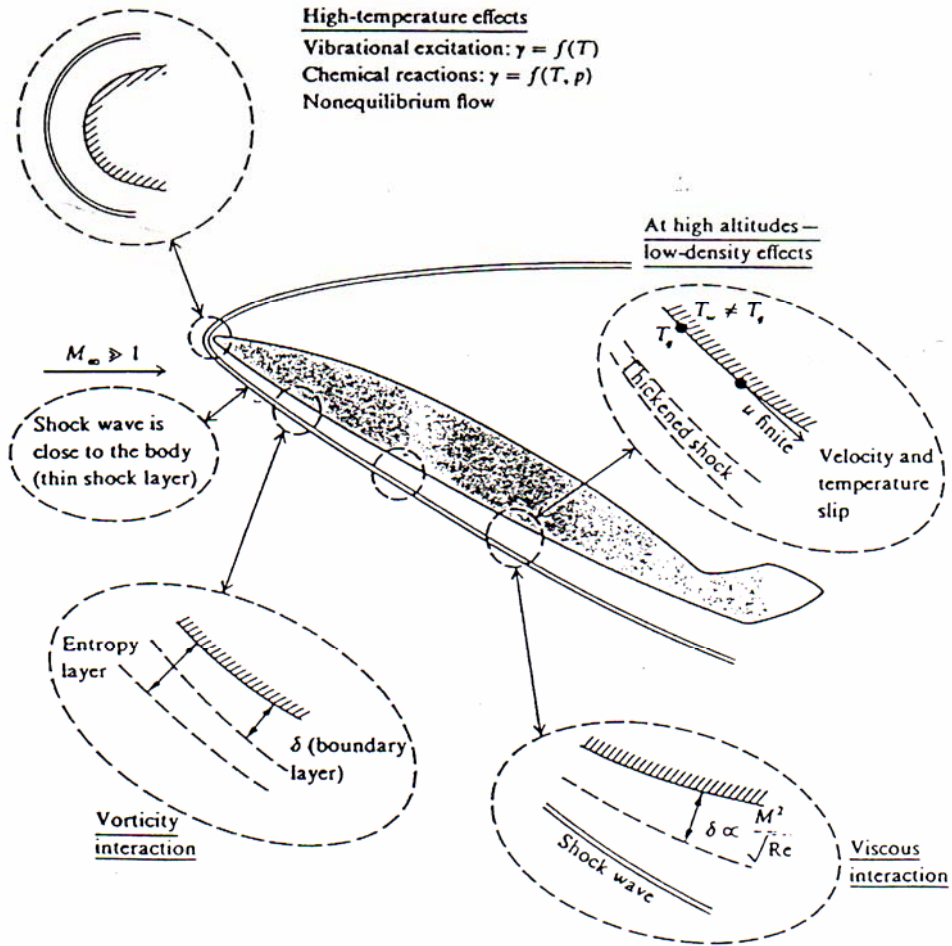


Figure 0.1 : Récapitulation des caractéristiques des écoulements hypersoniques [5].

Etude de l'Aérothermochimie

L'aérothermochimie (qui fait appel à des disciplines aussi diverses que l'aérodynamique, la thermodynamique et la chimie) est un domaine très vaste par la complexité des phénomènes mis en jeu ou des géométries étudiées. L'étude en vol est difficilement réalisable et il n'existe que peu de mesures prises lors des rentrées atmosphériques de la navette américaine. La simulation au sol est délicate mais est largement utilisée tant du point de vue fondamental que pour la conception des véhicules spatiaux. Avec le développement rapide des ordinateurs, la simulation numérique est en plein essor. Toutefois, elle reste d'une part limitée par les capacités des ordinateurs et elle est d'autre part tributaire de la validité des modèles utilisés et de l'efficacité et la précision des méthodes numériques employées.

Simulation expérimentale

La simulation expérimentale des phénomènes de thermochimie rencontrés au cours de rentrée atmosphérique impose naturellement d'utiliser aussi l'air lors des essais. Par ailleurs, ces phénomènes étant liés aux fortes températures régnant dans l'écoulement, il n'est plus possible d'augmenter le nombre de Mach dans la veine d'essais en diminuant la vitesse du son (c'est-à-dire la température). La vitesse réelle du fluide doit donc être reproduite. De plus, pour conserver l'échelle caractéristique des phénomènes chimiques, on montre que le produit ρL_{ref} de la masse volumique ρ et de la longueur de référence L_{ref} doit être reproduit [64]. On peut alors souligner que si la température régnant dans l'écoulement lors des essais est identique à la température réelle, l'analogie de nombre de Reynolds est automatiquement respectée.

Nous allons présenter brièvement deux moyens d'essais couramment utilisés pour la simulation d'écoulements hypersoniques

Tunnels balistiques

L'étude de la trajectoire peut se faire dans un tunnel dit balistique : la maquette est tirée à grande vitesse par un canon. Des moyens optiques, disposés le long du tunnel permettent de restituer la trajectoire et déduire par dérivation les forces aérodynamiques sur la maquette. On peut ainsi reproduire la vitesse et, si la pression du tunnel peut être contrôlée, le produit ρL_{ref} , la température du tunnel étant proche de celle du vol [39].

Les souffleries et tube à choc

Pour des vitesses inférieures à 2000 m.s^{-1} , l'assimilation de l'air à un gaz idéal est une hypothèse correcte. Les souffleries reproduisant le nombre de Mach, le nombre de Reynolds et le rapport T_p/T_0 (où T_p est la température de paroi et T_0 température du réservoir) permettent alors de déterminer, dans cette gamme de vitesses, des coefficients sans dimensions tel que le coefficient de traînée. On peut alors augmenter le nombre de Mach maximum pouvant être atteint dans la veine d'essais est ainsi dicté par la limite de liquéfaction de l'air

Malheureusement, ce principe n'est pas applicable au-delà d'un nombre de Mach de 6 puisque les effets de la thermochimie sont liés à la température. On doit donc reproduire la vitesse réelle de l'écoulement. Les souffleries permettant de telles simulations sont dites à hautes Enthalpie. Une vitesse de 7000 m. s^{-1} correspond en effet à une enthalpie d'environ $2.5 \cdot 10^7 \text{ J.kg}^{-1}$. Ce niveau d'enthalpie implique forcément que la température avoisine les $10\,000 \text{ °K}$. Ces conditions de température sont très sévères et ne peuvent être atteintes que pendant de brefs instants tant du point de vue de puissance mise en jeu que la résistance des matériaux. La durée typique des essais est inférieure un temps soit peu à 50 ms.

Il existe principalement deux types de souffleries

- Les souffleries à arc: l'énergie est obtenue par un arc électrique jaillissant entre deux électrodes dans une chambre contenant le fluide à échauffer.
- Les souffleries à Choc (Tube à Choc): les hautes pressions et hautes enthalpies sont engendrées par le passage d'une onde de choc dans un long tube cylindrique. Une membrane sépare deux enceintes remplies d'un gaz sous hautes pression pour l'une d'elle et basse pression pour la seconde. La rupture de la membrane provoque la formation et le déplacement d'une onde de choc qui comprime et met en mouvement le gaz initialement au repos à basse pression. Le tube à choc est principalement utilisé pour l'étude fondamentale des gaz à haute température. On peut aussi le prolonger par une tuyère alimentée par l'air à haute température et haute pression devenu immobile après la réflexion de l'onde de choc sur le fond du tube. On obtient ainsi une soufflerie à Choc réfléchi.

Simulation numérique

Modélisation

De même que pour la simulation expérimentale, la diversité et l'intensité des phénomènes présents dans les écoulements hypersoniques laisse présager de la difficulté à les reproduire par simulation numérique.

En milieu continu, la modélisation à partir des équations d'Euler pour un gaz réactif non visqueux, prend en compte la plupart de ces phénomènes. D'une mise en œuvre relativement simple. Elle permet en particulier d'étudier les ondes de choc et les phénomènes de déséquilibre (thermodynamique et chimique). Par ailleurs, les pressions à la paroi sont évaluées avec une bonne précision, conduisant ainsi à la détermination des coefficients aérodynamiques (coefficient de moment, de portance, de traînée, et de pression par exemple) . On peut toutefois noter que peu de codes pour des écoulements tridimensionnels incluent les phénomènes de déséquilibre [41, 49, 108,100, 139,144]. Une recherche bibliographique plus consistante est à envisager.

En couplant les équations d'Euler à des équations de couche limite, on aura alors accès par exemple au coefficient de frottement et au flux de chaleur à la paroi. La validité de l'approche au premier ordre est limitée par les effets de l'interaction visqueuse et du gradient d'entropie. Ces limitations peuvent être repoussées par l'adoption d'une approche déficitaire (voir par exemple pour un gaz idéal [23, 88] ou d'un couplage au deuxième ordre [111]).

La modélisation basée sur les équations de Navier – Stokes permet d'étudier les mêmes phénomènes en s'affranchissant des problèmes liés à l'interaction visqueuse et au gradient d'entropie. En contre partie, l'accroissement de la taille du problème rend quasiment impossible. L'étude simultanée des phénomènes de déséquilibres thermodynamique et des géométries complexes. Seuls quelques codes aussi généraux ont été recensés aux états Unis, voir par exemple les références [15, 50,80]. Et dont l'étude des géométrie tridimensionnelles est en général effectuée sous une hypothèse d'équilibre chimique.

Nous nous proposons le choix d'étudier dans ce mémoire des écoulements de fluide visqueux en déséquilibre chimique sur des géométries bidimensionnelles planes ou axisymétriques. Comme nous l'avons déjà souligné, la prédiction des flux de chaleur est un point important dans la conception d'un véhicule spatial. Des géométries simples axisymétriques permettent déjà de donner de bonnes informations sur le flux de chaleur, soit sur les nez émoussés des véhicules, représentés par des géométrie axisymétriques, soit sur la ligne de symétrie intrados en utilisant le concept de géométrie axisymétrique

équivalente. L'idée de cette étude est de permettre donc d'évaluer les effets du déséquilibre sur des géométries simples mais réalistes, tout en restant dans des coûts abordables

La modélisation que nous préconisons d'adopter sera basée sur les équations de Navier- Stokes pour un mélange de gaz réactif. Une approximation de couche mince y sera introduite.

Méthodes numériques

La présence d'onde de chocs forts aux seins des écoulements hypersoniques introduite, d'un point de vue numérique, des problèmes de stabilité de schéma de discrétisation au voisinage des ondes de chocs. Parmi les méthodes dites " Shock capturing " pour lesquelles l'onde de choc est à l'intérieur du domaine de calcul, on distingue principalement deux approches :

- L'approche classique utilisant des schémas de discrétisation centrés pour les termes de convection, l'apport de viscosité artificielle (opérateurs de deuxième et quatrième ordre) permettant de stabiliser le schéma. Leur inconvénient principal est la présence d'oscillations de la solution au voisinage des ondes de choc
- L'approche plus récente, basée sur des schémas décentrés, précis au deuxième ordre, au moins dans les zones où la solution est dite régulière. Ces schémas peuvent mettre en jeu des opérateurs non linéaires permettant de concentrer la diffusion numérique dans des zones de discontinuité de la solution, et qui favorise .Parmi ces schémas, on peut mentionner ceux qui possèdent la propriété TVD (Total Variation Diminishing ou Variation Totale Décroissante) et qui permettent de capturer les ondes de chocs sans introduire des oscillations parasites . Ils sont maintenant largement utilisés pour les simulations retenant l'hypothèse d'un gaz parfait ou déséquilibre chimique [161]. Cependant, leur extension à des problèmes comprenant des hypothèses de déséquilibre est toujours d'actualité et fait encore l'objet de développement théorique.

D'autre part, l'évaluation des flux de chaleur à la paroi impose la détermination correcte de la couche limite. En particulier, on devra s'assurer que les opérateurs mathématiques (la dissipation numérique) qu'on aura à introduire, éventuellement pour stabiliser le schéma reste faible devant la dissipation physique dans la couche limite.

Enfin, les écoulements visqueux en déséquilibre (thermodynamique et / ou chimique) présentent de nombreuses échelles de temps caractéristiques pouvant différer de plusieurs ordres de grandeur, conduisant à un problème raide. Dans ce cas, le choix du schéma de discrétisation temporelle des équations devra tenir compte des contraintes imposées, par ces échelles de temps, pour la stabilité de l'algorithme à promouvoir. En particulier, les temps caractéristiques qui seront associés à la production chimique sont généralement les plus rapides et dictent donc les contraintes de stabilité. Il sera alors préférable d'utiliser des méthodes traitant les termes sources de façon implicite

Plan du mémoire

Le mémoire sera divisé en trois parties. Dans la première partie nous précisons la modélisation retenue et les équations utilisées, puis nous proposons de décrire la mise en œuvre numérique dans la deuxième partie avant enfin de présenter les principaux résultats obtenus et ça sera le thème de la troisième partie.

Dans la première partie nous allons préciser tout d'abord la géométrie et les phénomènes physiques et chimiques impliqués. Ensuite nous présenterons une modélisation mathématique des phénomènes précités. Cette modélisation précisera les équations de l'aérodynamique, du transfert thermique, et de la thermochimie, ainsi que leurs conditions initiales et aux limites. Une recherche bibliographique est plus que nécessaire pour la réactualisation de nos connaissances dans ce domaine via le problème tel que nous essayerons de le poser par rapport à l'évolution informatique, technique et scientifique en cours.

La partie suivante sera consacrée à la formulation numérique du problème. Des notions concernant les équations scalaires hyperboliques seront rappelées, nous insisterons en particulier sur le cas d'équations scalaires qui permettront une présentation simplifiée des schémas choisis pour la discrétisation des flux convectifs. Quelques définitions de base, assorties d'exemples de schémas numériques seront étudiées avant de donner la formulation de la discrétisation du jeu final d'équations.

La troisième et dernière partie sera consacrée à la préparation du code de calcul et l'application des techniques mises en œuvre à différents cas tests. Dans cette partie nous essayerons de présenter et interpréter les résultats obtenus. Nous étudierons l'influence du choix du schéma, des fonctions limiteurs intervenant dans la construction de ce dernier à partir de certaines études (exemples) effectuée sur des cas classiques du tube à choc.

Nous tirerons enfin une conclusion et dégagerons éventuellement des perspectives de recherche ultérieurement.

Part I

MODELISATION-EQUATIONS

Chapitre 1

1. Introduction

1.1. Domaine de validité des équations de Navier–Stokes

Au cours d’une rentrée atmosphérique, une navette traverse différents milieux selon l’altitude à laquelle elle se trouve. Pour déterminer le domaine de validité en altitude de la modélisation à choisir, on introduit un paramètre caractérisant le taux de dilution de l’air : le nombre de Knudsen. Il représente le rapport entre le libre parcours moyen λ (c. à d. : la distance entre deux collisions moléculaires successives) et une dimension L caractéristique de l’objet :

$$Kn = \lambda/L$$

Lorsque ce nombre est petit, le milieu rencontré est continu, tandis que lorsque sa valeur est grande, on parle de milieu moléculaire libre. Vincenti et Krüger [142] proposent une relation pour évaluer l’échelle de longueur microscopique λ pour un fluide comprenant des molécules identiques :

$$\lambda = \frac{m}{\sqrt{2}\pi d^2 \rho}$$

Où ρ est la masse volumique du fluide, m sa masse moléculaire et d le diamètre des molécules. L’ordre de grandeur de λ ainsi obtenu à une altitude de 80 km ($\rho = 10^{-5}$ kg/m³, $m = 0.029/6.02 \cdot 10^{23}$ kg et $d = 3.5 \cdot 10^{-10}$ m) est $\lambda = 0.009$ m. La table 1.1 donne la correspondance entre le nombre de Knudsen et l’altitude.

Tableau 1.1 : Rentrée atmosphérique : Différents Milieux Rencontrés [68]

Kn_∞	H (km)	Caractérisation
$\ll 1$	≤ 80	Milieu Continu
$\in [0.01, 0.1]$	$\in [80, 100]$	Milieu Continu avec Conditions de Glissement
$\in [0.1, 10.]$	$\in [100, 120]$	Théorie Cinétique des gaz
$\geq 10.$	> 120	Moléculaire Libre

D’après la figure 1.1, pour des altitudes supérieures à 120 km le nombre de Knudsen dépasse la dizaine et l’écoulement est moléculairement libre, l’interaction entre les molécules étant faible, Entre 100 et 120 km, le nombre de knudsen varie entre 0.1 et 10 : les collisions entre les molécules deviennent fréquentes. C’est le domaine de la cinétique des gaz régi par les équations de Boltzmann. Une méthode courante pour l’étude de tels régimes d’écoulement est la simulation statistique de Monté – Carlo développée par Bird [17]

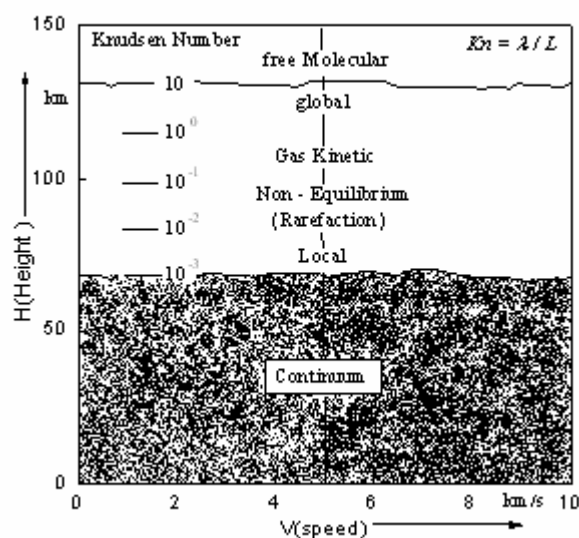


Figure 1.1: Influence de l'altitude sur la modélisation du milieu rencontré $L = 1$ m [67]

Pour des altitude comprises entre 80 et 100 km, le nombre de Knudsen diminue et l'hypothèse d'un milieu continu peut raisonnablement être appliquée lorsque Kn est inférieur à 0.2, les expressions de Chapman Enskog pour le calcul des coefficients de transport sont applicables [92], et on entre alors dans le domaine de validité des équations de Navier – Stokes avec cependant, des restrictions dans les régions de forts gradients. En effet, dans ces zones, la longueur caractéristique de l'écoulement, soit typiquement l'épaisseur de ces zones, peut être faible par rapport au libre parcours moyen. Ainsi près des parois, dont la température est froide, on observe une "couche de Knudsen" de l'ordre du parcours moyen, siège de forts gradients dans cette zone, l'écoulement ne peut plus être considéré comme continu et on doit utiliser les équations de Boltzmann : les conditions aux limites sont données par les conditions à la paroi et les grandeurs à l'extérieur sont obtenues par les équations de Navier – Stokes. En pratique, on introduit plutôt un modèle dit de glissement pour les vitesses et les températures dans les conditions aux limites des équations de Navier- Stokes. Ces dernières restent ainsi valides pour des nombres de Knudsen entre 0.03 et 0.1

En ce qui concerne les ondes de chocs, leur épaisseur étant généralement très faible, leur structure interne ne peut être déterminée à partir des équations de Navier – Stokes, pour des nombres de Mach supérieur à 2 [142]. L'utilisation des équations de Burnett, qui retiennent un ordre de grandeur supplémentaire dans le développement des équations de Boltzmann, est une très judicieuse alternative. Les résultats obtenus avec cette modélisation sont en bon accord avec ceux obtenus par la méthode de Monté – Carlo pour une onde de choc monodimensionnelle [44,86]. L'application des équations de Burnett et de super Burnett à des fluides bidimensionnels est toujours d'actualité dans plusieurs recherches. [86]

A la base de ce qui a été dit précédemment, nous allons essayer de nous limiter à des altitudes inférieures à 80 km pour les quelles l'hypothèse d'un milieu décrit par les équations de Navier – Stokes sans conditions de glissement est valable. Il faut cependant, ajouter que les limites de validité des données ci-dessus sont résumées sur

la figure 1.2 représentent essentiellement des ordres de grandeurs et ne constituent en aucune manière des limites précises de validité de chacun de ces régimes .

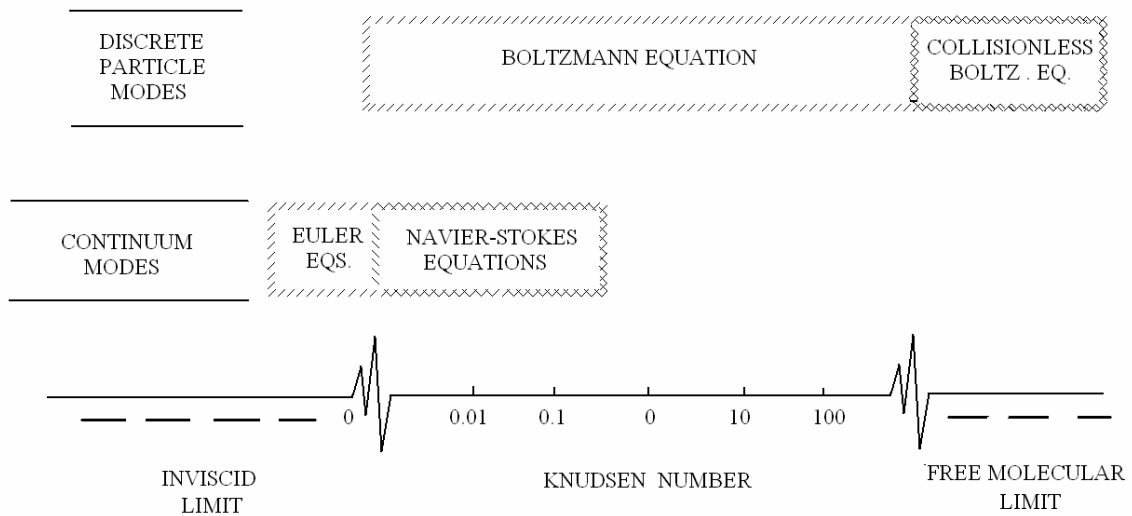


Figure 1.2: relation entre le nombre de Knudsen et la modélisation de l'écoulement

1.2. Phénomènes liés au déséquilibre

On introduit généralement pour caractériser un écoulement le nombre de Mach (à l'infini amont) , qui traduit le rapport de la vitesse de l'écoulement et de la vitesse du son . Si le passage d'un écoulement à un écoulement supersonique est parfaitement déterminé par le nombre de Mach unité, la frontière entre l'écoulement supersonique et l'écoulement hypersonique est plus arbitraire (on s'accorde à fixer cette frontière pour un nombre de Mach égale à cinq) . Mais plus que le nombre de mach de l'écoulement, c'est sa vitesse ou, de façon équivalente, son niveau Enthalpique qui est la véritable caractéristique du régime hypersonique.

En effet, à travers l'onde de choc qui se trouve devant le nez de l'appareil, l'air est brusquement freiné et pratiquement toute son énergie cinétique est transformée en énergie interne. La température augmente alors fortement ce qui modifie la répartition d'énergie au niveau moléculaire. Si on considère par exemple une molécule diatomique : outre l'énergie de translation associée au mouvement du centre de masse , elle possède aussi des énergie de rotation (rotation autour du centre de masse) , de vibration (selon l'axe de liaison inter atomique) et d'excitation électronique (liée au changement d'orbites des électrons) . Un atome possède seulement des énergies internes de translation et d'excitation électronique. La répartition de l'énergie interne entre ces différents modes est a quantifiée et les échanges d'énergie ont lieu à travers les les chocs moléculaires. On peut aussi ajouter que chaque redistribution d'énergie demande un certain temps de relaxation, qui correspondrait à un certain nombre de collisions, pour que le retour vers un état d'équilibre s'effectue.

A températures ambiantes, seules les modes de translation et de rotation sont excités, leur relaxation est très rapide, elle ne requiert environ que cinq collisions. L'air se comporte alors comme un gaz idéal : les capacités calorifiques à pression constante C_p et à volume constant C_v sont indépendantes de la température. Lorsque la température

Chapitre 1 : INTRODUCTION

commence à augmenter, les autres modes sont excités, l'air ne peut alors plus être assimilé à un gaz idéal. De plus l'étirement des liaisons inter atomiques dû à la vibration moléculaire et à la force centrifuge engendrée par la rotation peut entraîner la rupture d'une liaison et donner lieu à des phénomènes de dissociation chimique.

D'autre part, lorsque les électrons reçoivent une certaine quantité d'énergie, ils peuvent sauter sur une orbite correspondant à un niveau d'énergie plus élevé. Le retour à une orbite d'énergie inférieure s'accompagne par l'émission d'un photon : c'est le rayonnement. Si l'énergie reçue est suffisante, l'excitation électronique peut donner lieu à l'ionisation de la particule (atome ou molécule).

On voit ainsi que l'écoulement hypersonique met en jeu des phénomènes nouveaux par rapport à ceux rencontrés en supersonique : la composition de l'air et ses propriétés sont modifiées.

La modélisation des écoulements hypersoniques devra donc prendre en compte tous ces différents phénomènes.

On peut alors associer à chacun de ces phénomènes nouveaux un paramètre significatif lié à son temps caractéristiques. En effet, chacun des processus décrits ci-dessus (translation, rotation, vibration, dissociation et excitation électronique) tend vers l'équilibre à travers les collisions entre particules. Si le temps caractéristique pour atteindre l'équilibre est très petit devant le temps caractéristique lié au mouvement d'un élément de fluide dans l'écoulement, on considère que le processus est à l'équilibre. Sinon, il sera en déséquilibre.

Le nombre de Damköhler Da traduit le rapport entre le temps t caractéristique de l'écoulement (par exemple $t = L/U_\infty$, où U_∞ est la vitesse à l'infini amont) et le temps de relaxation τ du processus considéré (excitation vibrationnelle, phénomènes de dissociation, ... etc.) : $Da = t/\tau$. Les faibles valeurs de ce nombre indiquent que le phénomène étudié est figé (frozen), on peut dire que si on étudie entre autres les phénomènes de dissociation, cela signifie que les concentrations des espèces ne varient pas au sein de l'écoulement, tandis que les fortes valeurs du nombre de Damköhler sont représentatives de l'équilibre.

On a vu précédemment que les énergies de translation et de rotation ne demandaient que quelques collisions pour atteindre leur niveau d'équilibre. Leur déséquilibre n'aura donc lieu que dans des cas extrêmes ; par contre, l'énergie de vibration et les phénomènes de dissociation ont des temps de relaxation plus importants et le déséquilibre peut alors dans ce cas intervenir et se manifester.

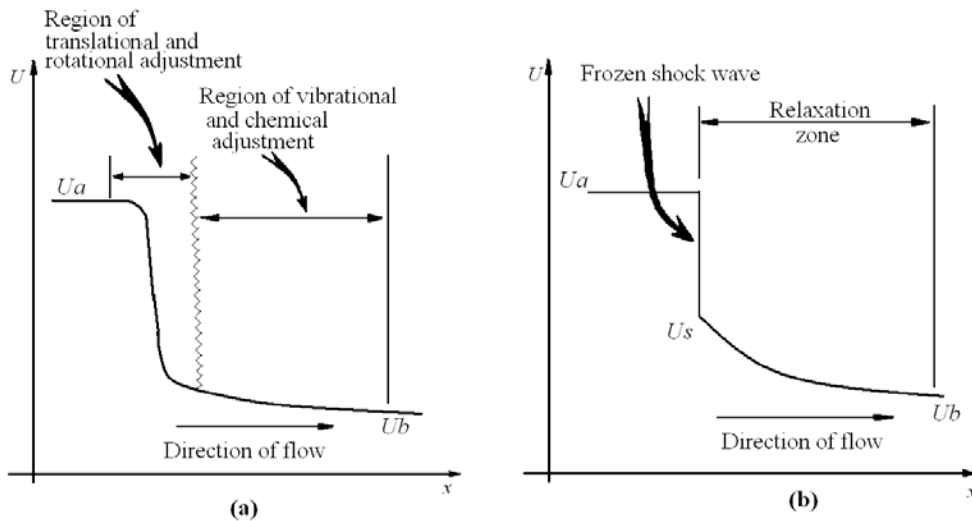


Figure 1.3: Distribution de la vitesse à travers une onde de choc normale
situation réelle, (b) situation idéalisée

La figure 1.3 montre qualitativement l'évolution de la vitesse à travers une onde de choc. A l'infini amont l'air est en équilibre, puis la vitesse décroît rapidement. L'épaisseur de cette zone de forts gradients est suffisante pour que les énergies de translation et de rotation atteignent leurs valeurs d'équilibre mais l'énergie de vibration et les phénomènes de dissociation s'ajustent lentement pendant que la vitesse diminue graduellement. On peut alors schématiquement faire intervenir deux zones pour la description du processus : une première où les températures de translation et de rotation prennent instantanément leur valeur d'équilibre, tandis que la température de vibration et de composition chimique sont dans un état figé (frozen) : c'est l'onde de choc. Dans la seconde région, la température de vibration et les phénomènes de dissociation atteignent progressivement leurs valeurs d'équilibre : c'est la zone dite de relaxation.

Pendant cette phase, on considère que les températures de translation et de rotation restent en équilibre. Si par exemple, seul le déséquilibre chimique est étudié, on considère alors que la température de vibration prend instantanément sa valeur d'équilibre à travers l'onde de choc.

La simulation de la couche de choc (zone comprise entre l'onde de choc et la paroi de l'appareil) pour un écoulement supersonique doit donc pouvoir tenir compte des éventuelles relaxations vibrationnelles et chimiques.

1.3. Autres caractéristiques de l'écoulement

Pour un écoulement de révolution autour d'un corps émoussé, l'ordre de grandeur de la distance δ de détachement de l'onde de choc est $\delta = \varepsilon_{Co} R_N$, où R_N est le rayon de la géométrie considérée et $\varepsilon_{Co} = \rho_\infty / \rho_{Co}$ facteur de compressibilité (l'indice Co caractérise des quantités derrière l'onde de choc). Pour une onde de choc normale :

$$\varepsilon_{Co} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} + \frac{2}{\gamma + 1} \frac{1}{M_\infty} \quad , \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v}$$

Lorsque le nombre de Mach à l'infini amont M_∞ augmente ε_{Co} diminue jusqu'à la valeur limite $(\gamma - 1) / (\gamma + 1)$, de plus, les effets de gaz réel ont tendance à diminuer la valeur de γ et par conséquent à réduire la distance de détachement, L'onde de choc est alors très proche de la paroi et a une forte courbure..

Le saut d'entropie à travers l'onde de choc est, de ce fait, très différent d'une ligne de courant à l'autre. Dans la région du nez où la courbure de l'onde de choc est très importante, la couche de choc présente donc de forts gradients d'entropie, En revanche sur l'arrière du corps, l'onde devient quasiment rectiligne : les gradients d'entropie sont alors confinés (reclus) dans une zone proche de la paroi, alimenté par les lignes de courant ayant traversé l'onde de choc près du nez émoussé. La couche limite, moins épaisse que la couche d'entropie dans la région du nez, est contenue alors largement sur l'arrière – corps : c'est le phénomène d'avalement d'entropie.

Enfin, comme les densités rencontrées lors d'une rentrée atmosphérique sont faibles, les nombres de Reynolds sont modérés ($Re = \rho UL / \mu$ traduit le rapport des forces d'inertie et des forces liées à la viscosité) tandis que le nombre de Mach sont élevés. L'épaisseur de la couche limite, proportionnelle à $M_\infty^2 / Re^{1/2}$, est alors importante relativement aux dimensions de la couche de choc. Il en résulte que le paramètre d'interaction visqueuse, proportionnel à $M_\infty^2 / Re^{1/2}$, a aussi des valeurs élevées [37], d'où une forte interaction entre la couche limite et l'écoulement externe.

De même que lors des avalement de la couche d'entropie , l'interaction visqueuse ne peut être prise en compte dans l'approche classique : résolution des équations d'Euler suivie de la résolution des équations de la couche limite au premier ordre . Il faut alors envisager des méthodes de couplages plus avancés (Euler / boundary layer) [23, 111], ou résoudre les équations de Navier - Stokes, cette dernière approche permet alors de traiter des géométries plus complexes puisque les décollements peuvent être également résolus.

D'autre part, au dessus d'une altitude d'environ 40 km, l'écoulement peut être considéré comme laminaire car les nombres de Reynolds rencontrés sont assez modérés. En deçà, la couche limite devient turbulente sur l'intrados de l'appareil.

1.4. Spécificité de la modélisation a retenir

Pour des applications hypersoniques de type rentrée atmosphérique, nous nous attellerons à étudier la résolution numérique des équations de Navier-Stokes pour un écoulement bidimensionnel : plans et/ou axisymétrique, laminaire, en déséquilibre chimique. Nous supposons par ailleurs l'hypothèse d'un écoulement à l'équilibre vibrationnel, bien que cette dernière puisse être sujette à caution. Néanmoins, elle permettra de simplifier notablement le problème et d'en limiter la taille, sachant a priori que ce déséquilibre vibrationnel, ajoutera autant d'équation qu'il y'a de molécules

différentes dans le gaz considéré. <on contre partie, les températures juste derrière l'onde de choc sont plus élevées que dans le cas du déséquilibre thermique, où la température de vibration reste figé (frozen) à travers l'onde de choc, le taux de production chimiques sont ainsi surestimés près de l'onde de choc, c qui inévitablement augmentera la raideur des équations [98]

D'autre part, nous aurons la latitude de pouvoir décider de la négligence des phénomènes d'ionisation sachant que pour des vitesses à l'infini allant jusqu'à 6000 m.s^{-1} , seul le ; monoxyde d'azote *NO* est concerné car le taux d'ionisation peut être de l'ordre de 1%. La présence d'électron libres a peu d'influence sur l'écoulement mais peut conduire à des effets de "Black out". De même, le rayonnement ne devient important qu'à partir de 8000 m.s^{-1} . [69]

L'air est donc considéré en premier lieu, comme un mélange de cinq gaz parfaits : L'azote et l'oxygène moléculaires et atomiques et le monoxyde d'azote, soit respectivement : N_2 , O_2 , N , O , NO , et en deuxième lieu en d'équilibre chimique.

Enfin, les écoulements a étudiés présentent une direction privilégiée (la direction longitudinale) selon laquelle les gradients intervenant dans les termes visqueux sont faibles devant les gradients transversaux et pourront être négligés. C'est l'effet de cisaillement de la couche mince.

Dans cette partie, et dans un premier temps, nous présenterons les équations qui gouvernent l'écoulement, puis nous donnerons la représentation thermodynamique du mélange. Chaque constituant suit en effet une loi d'état qui prend en considération les déviations par rapport à un gaz parfait. Nous essayerons de nous intéresser ensuite aux coefficients de transport dont l'expression est modifiée pour tenir compte des hautes températures avant d'aborder la cinétique chimique. Dans le cas d'écoulement réactif. La paroi peut participer aux réactions chimiques par combustion ou ablation et nous décrirons les phénomènes de catalyse. Nous dresserons enfin u bilan récapitulant le jeu final des équations à traiter.

Chapitre 2

2. Equations de l'Aérothermochimie

Nous présentons ici les équations de l'aérothermochimie (appelées souvent par extension et par souci de clarté équations de Navier – Stokes étendues à des écoulements réactifs), dans un domaine bidimensionnel plan [142]. Toutes les variables utilisées ici sont des variables physiques (avec dimension)

2.1. Equations de bilan

Considérons tout d'abord l'équation de bilan de l'espèce I :

$$\frac{\partial \rho_I}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_I u_I)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_I v_I)}{\partial y} = \omega_I \quad (2.1)$$

Où t représente la variable temporelle, x et y sont les directions d'espace, ρ_I la masse volumique de l'espèce considérée, u_I et v_I les composantes de sa vitesse et ω_I son taux de production par réaction chimique.

Définissons la vitesse moyenne et la masse volumique de l'écoulement :

$$u = \sum_{I=1}^{ns} \frac{\rho_I}{\rho} u_I, v = \sum_{I=1}^{ns} \frac{\rho_I}{\rho} v_I, \rho = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I \quad (2.2)$$

Où le nombre ns est le nombre d'espèces en présence, et introduisons la vitesse de diffusion qui traduit l'écart entre la vitesse de l'espèce I et la vitesse moyenne :

$$u_{DI} = u_I - u \quad , \quad v_{DI} = v_I - v \quad (2.3)$$

L'équation de bilan s'écrit alors sous la forme :

$$\frac{\partial \rho_I}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_I u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_I v)}{\partial y} = - \frac{\partial(\rho_I u_{DI})}{\partial x} - \frac{\partial(\rho_I v_{DI})}{\partial y} + \omega_I \quad (2.4)$$

La sommation de toutes les équations de bilan conduit à l'équation de conservation de masse totale (du fait de la conservation de la masse, on a $\sum_{I=1}^{ns} \omega_I = 0$)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (2.5)$$

On voit ainsi que deux jeux équivalents d'équations sont à notre disposition le premier comprend toutes les équations de bilan des espèces, tandis que le second est formé de toutes les équations du bilan des espèces moins une, plus l'équation globale de

conservation de la masse .Nous allons essayer (préférence) d'utiliser la première approche qui permet un traitement analogue de toutes les espèces. La deuxième solution en effet, met de côté une espèce, dont la masse volumique est calculée par la différence entre la masse volumique totale et les masses volumiques des autres espèces. D'un point de vue numérique, toutes les erreurs d'arrondis sont ainsi cumulées sur la même espèce.

La sommation des équations de quantité de mouvement élémentaires conduit à l'équation de conservation de la quantité de mouvement du mélange :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + P)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} &= -\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + P)}{\partial y} &= -\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Où P est la pression totale de l'écoulement et τ le tenseur des contraintes visqueuse.

L'équation de conservation de l'énergie totale du mélange est obtenue de façon similaire, par sommation des équations pour chacune des énergies partielles :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial[u(E + P)]}{\partial x} + \frac{\partial[v(E + P)]}{\partial y} &= -\frac{\partial \phi_x}{\partial x} - \frac{\partial \phi_y}{\partial y} \\ &\quad - \frac{\partial(u\tau_{xx} + v\tau_{xy})}{\partial x} - \frac{\partial(u\tau_{yx} + v\tau_{yy})}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Où E représente l'énergie totale du mélange et ϕ le flux de chaleur.

On obtient ainsi un système de $ns + 3$ équations pour $ns + 3$ inconnues ($\rho_1, \dots, \rho_{ns}, \rho u, \rho v, E$), à condition de modéliser les termes de diffusion ainsi que les termes de production chimique ω_i et de donner la représentation thermodynamique du système (c'est-à-dire : obtenir la loi reliant la température, les fractions massiques et l'énergie interne du mélange) et l'équation d'état (reliant la pression, la température et les masses volumiques partielles).

Chapitre 3

3. Représentation thermodynamique

3.1. Définitions

Dans les équations qui régissent l'écoulement, l'enthalpie est la variable qui est la plus commode pour exprimer l'état énergétique.

Comme on considère chaque constituant du mélange comme un gaz parfait, l'enthalpie d'une espèce est uniquement fonction de la température :

$$h_I = \int_0^T C_{pI} dT + h_I^0 \quad (3.1)$$

h_I^0 est la chaleur de formation de l'espèce I . Si on prend comme conditions de référence les conditions naturelles atmosphériques ; cette chaleur est nulle pour les molécules d'Azote et d'Oxygène. En revanche, pour toutes les espèces produites par réactions chimiques, cette chaleur est différente de zéro. C_{pI} est la chaleur spécifique de l'espèce I et dépend de la température.

Si h est l'enthalpie spécifique du mélange gazeux :

$$h = \sum_I C_I h_I \quad (3.2)$$

Alors la chaleur spécifique à pression constante du mélange sera :

$$C_p = \frac{\partial h}{\partial T} = \sum_I C_I \frac{\partial h_I}{\partial T} = \sum_I C_I C_{pI} \quad (3.3)$$

3.2. Modes de stockage de l'énergie des molécules

A cause du haut niveau d'énergie cinétique qui se transforme en énergie thermique derrière l'onde de choc, les caractéristiques macroscopiques de l'air sont modifiées. A leur tour, ces modifications de l'état naturel des molécules d'air influencent d'une manière fondamentale les caractéristiques macroscopiques de l'écoulement. Pour étudier ces phénomènes on essaiera d'examiner qualitativement les comportements

naturels des molécules qui forment un gaz et aussi les changements qui se produisent lorsqu'on éloigne ces molécules de leur état naturel.

Pour simplifier l'analyse, dans tout ce qui suit, on assimile les atomes à des sphères rigides et les molécules sont supposées constituées d'atomes liés par des ressorts raides. On considère de plus que l'interaction moléculaire est faible [5, 9, 25,42]. on pourra utilement se reporter à la référence [142], dont nous nous sommes très largement inspirée.

Une particule (atome ou molécule) est animée d'un mouvement brownien (figure 3.1) dans l'espace, associé à une énergie de translation (trois degrés de liberté) qui tend vers un niveau d'équilibre à travers les collisions entre particules, lesquelles pendant leurs mouvements, elles s'entrechoquent. L'échange d'énergie cinétique homogénéise le niveau d'énergie entre ces dernières, d'autre part, l'énergie échanger pendant les chocs peut aussi être utilisée par les électrons pour sauter d'un orbite à l'autre, entraînant une modification de l'énergie d'excitation électronique une particule (atome ou molécule) est animée d'un mouvement brownien (les niveaux d'énergie élevés sont quantifiés et le retour des électrons à leur orbites naturels s'accompagne d'un rayonnement). L'excitation électronique retourne à l'équilibre énergétique après très peu de choc entre les particules. Il existe de plus un mouvement de rotation de la molécule autour de son centre de masse issue de la réception par cette dernière d'une partie de l'énergie que les molécules se transmettent pendant les chocs. Les atomes sont neutres vis-à-vis de la rotation parce que les chocs se font toujours sur un axe passant par leurs centres. Ce mouvement d'inertie autour de l'axe formé par la liaison inter atomique est faible. Les atomes ne sont pas sensibles à la rotation car leur inertie de rotation est quasiment nulle. Par exemple, les molécules diatomiques ont deux degrés de liberté de rotation (le moment d'inertie autour de l'axe principal qui lie les deux atomes est très faibles)

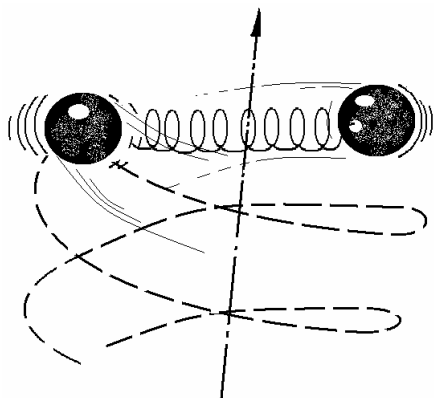


Figure 3 1: schématisation du mouvement interne des molécules diatomiques

La translation et la rotation sont deux mouvements qui ont besoin quasiment des mêmes niveaux d'énergie. Très peu de collisions sont suffisantes pour équilibrer la distribution d'énergie entre ces deux mouvements.

Enfin et après un certain seuil d'énergie, une molécule peut vibrer le long de l'axe formé par la liaison inter atomique. Pendant la vibration, le travail est fait contre le ressort qui représente la liaison entre deux atomes d'une molécule. Cette liaison est très rigide et la vibration à un seul degré de liberté, mais l'énergie requise est deux fois plus grande parce qu'en plus de l'énergie cinétique de la vibration, l'énergie potentielle du ressort entre en jeu. Vu la rigidité de la liaison, le nombre de collisions nécessaire pour la relaxation vibratoire est très grand. Pour cette raison, l'étude des écoulements très

rapides comme dans les tubes à chocs peut imposer de prendre en compte le déséquilibre thermodynamique pour le mode de vibration. Bien entendu, cette dernière forme d'énergie n'existe pas pour les atomes. Ces mouvements ne sont pas indépendants les uns des autres car par exemple la force centrifuge liée à la rotation affecte la vibration, tandis que les variations de moment d'inertie provoquées par la vibrations ont une influence sur la rotation.

Si l'énergie que l'on fournit au gaz devient très grande, les électrons qui sont montés à des orbitales de niveau d'énergie plus grand que l'état naturel, peuvent quitter l'atome ou la molécule auxquels ils appartiennent, c'est l'ionisation. D'une manière analogue, la liaison entre les atomes d'une molécule peut se casser pendant sa vibration à cause d'une collision supplémentaire et la dissociation apparaît. Du fait des niveaux de températures que l'on va rencontrer, l'ionisation est négligée au préalable, par contre, la dissociation est l'un des points les plus importants dans ce travail. Chaque mode de stockage de l'énergie est quantifiée et l'étude de la répartition de l'énergie entre les différents modes fait appel à la mécanique statistique.

Enfin l'étude des molécules qui ont plus de deux atomes devient beaucoup plus complexe et dans les conditions de vols prises en considération dans cette étude, la présence des molécules poly-atomiques est minime et ce choix est justifié.

3.3. Mécanique statistique

L'existence d'une distribution la plus probable de l'énergie pour un système isolé à volume V , nombre de particules $N = \sum_i n_i$ et énergie totale $E = \sum_i n_i \varepsilon_i$ constants, est démontrée par la mécanique statistique et cette distribution est due à Boltzmann. Si le nombre de particules est grand, cette distribution est toujours vérifiée. Par contre, à très basse température, la statistique de Boltzmann n'est plus applicable et on utilise généralement les distributions de Fermi-Dirac ou Bose-Einstein.

Dans un tel système, l'énergie d'une particule est quantifiée, c'est-à-dire quelle ne peut pas varier d'une manière continue et ne peut être qu'à des niveaux discrets $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_i$. A la valeur de chacun de ces niveaux peuvent correspondre des combinaisons différentes des états inférieurs. Ces combinaisons sont appelées " les états quantiques "

On appelle g_i la dégénérescence du niveau d'énergie ε_i le nombre moyen des particules correspondant à l'un de ces niveaux d'énergie n_i est donné par une distribution de Boltzmann :

$$n_i = N \frac{g_i e^{-\beta \varepsilon_i}}{Q} \quad (3.5)$$

Où $\beta = 1/kT$ (k étant la constante de Boltzmann), $Q = \sum_i g_i e^{-\beta \varepsilon_i}$ est la fonction partition et $e^{-\beta \varepsilon_i}$ sont les fonction d'état d'énergie.

L'entropie d'un tel système est donnée par la thermodynamique statistique :

$$S = k (N \ln Q - \beta E - N \ln N + N) \quad (3.6)$$

Cette relation reste valable si N , E et V sont constant ou varie lentement. Alors

$\left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V,N} = -k\beta$. Les variables thermodynamiques usuelles s'expriment de façon simple

en fonction de Q . La seule relation que nous donnerons ici est celle pour l'énergie :

$$\varepsilon = NKT^2 \frac{\partial(\ln Q)}{\partial T} \quad (3.7)$$

Si on a suffisamment d'informations détaillées sur les niveaux d'énergie. On peut estimer toutes les caractéristiques thermodynamiques d'un gaz à partir de sa fonction de partition qui est la relation entre la thermodynamique et la mécanique statistique tout en considérant que l'énergie totale peut s'écrire comme la somme des énergies quantités des différents modes de stockage :

$$\varepsilon_t = \varepsilon_{tr} + \varepsilon_{rot} + \varepsilon_{vib} + \varepsilon_{electro} \quad (3.8)$$

C'est-à-dire en négligeant le couplage entre les divers modes , on trouve que la fonction de partition peut se factoriser suivant :

$$Q = Q_{tr} + Q_{rot} + Q_{vib} + Q_{electro} \quad (3.9)$$

Cependant il est tout a fait évident que la rotation et la vibration sont deux mouvements couplés principalement par la variation du moment d'inertie de rotation de la molécule à cause de l'éloignement cyclique des atomes pour remédier à cette erreur, on ajoute des termes de correction de couplage, la vibration peut être prise en compte qu'en supposant que les molécules sont des oscillateurs harmoniques. En fait, à haute température des anharmonicités perturbs les oscillations. Une correction est apportée dans les expressions des fonctions de partition

3.3.1. Contribution de la translation

On obtient pour la fonction de partition :

$$Q_{tr} = V \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.10)$$

Où h est la constante de Planck, sachant que la masse molaire est $M=N.m$ et que l'équation d'état donne $PV = NKT$ d'où :

$$\frac{Q_{tr}}{N} = k \left(\frac{2\pi Mk}{Nh^2} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{T^{\frac{5}{2}}}{P} \quad (3.11)$$

Ce qui donne pour l'énergie spécifique (notée ε_{tr}) et la capacité calorifique :

$$\varepsilon_{tr} = \frac{3}{2}RT \quad , \quad C_{V_{tr}} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{tr}}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2}R \quad (3.12)$$

Où $R=k/m$ est la constante du gaz par unité de masse, m étant la masse des particules (supposée identiques) constituant le gaz .On retrouve ainsi un résultat classique pour les gaz monoatomiques $C_{V_{tr}}=3/2 R$ à faible température.

3.3.2. Contribution de la rotation

La fonction de partition s'écrit (Schrödinger) :

$$Q_{rot} = \frac{1}{\sigma} \left(\frac{T}{\theta_{rot}} \right) \text{ avec } \theta_{rot} = \frac{h^2}{8\pi I k} \quad (3.13)$$

Où I représente le moment d'inertie et où $\sigma = 2$ pour une molécule symétrique et $\sigma = 1$ pour une molécule hétérogène. θ_{rot} est la température caractéristique de la rotation qui peut être obtenue à partir des mesures par spectroscopie. Ses valeurs sont proches du zéro absolu : 2.1°K pour l'oxygène moléculaire, 2.9°K pour l'azote moléculaire et 2.5°K pour le monoxyde d'azote. Par dérivation, on trouve que l'énergie de partition :

$$\varepsilon_{rot} = RT \quad , \quad C_{V_{rot}} = R \quad (3.14)$$

On retrouve aussi le résultat classique pour les gaz diatomiques à faible température :

$$C_V = C_{V_{tr}} + C_{V_{rot}} = \frac{5}{2} R \quad (3.15)$$

3.3.3. Contribution de la vibration.

On considère la molécule comme un oscillateur harmonique de fréquence ν . La mécanique quantique indique les états d'énergies possibles pour $\varepsilon_i=(i+1/2) h\nu$ où $i=0,1,\dots,\dots,\varepsilon_0=1/2 h\nu$ est l'énergie de l'état de base par convention on mesure l'énergie par rapport à cet état , soit $\varepsilon_i=i h\nu$. On trouve pour la fonction de partition :

$$Q_{vib} = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-ih\nu kT} \text{ avec } x = e^{-h\nu kT} \text{ on aura } Q_{vib} = \sum_{i=0}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x}$$

$$\text{soit } Q_{vib} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\theta_{vib}}{T}}} \text{ avec } \theta_{vib} = \frac{h\nu}{k}$$

D'où :

$$\varepsilon_{vib} = \frac{R\theta_{vib}}{e^{\frac{\theta_{vib}}{T}} - 1} \text{ et } C_{V_{vib}} = R \left(\frac{\theta_{vib}}{T} \right) \frac{e^{\frac{\theta_{vib}}{T}}}{\left(e^{\frac{\theta_{vib}}{T}} - 1 \right)^2} \quad (3.16)$$

Où θ_{vib} est une température caractéristique de la vibration déterminée par spectroscopie ($\theta_{vib} = 2270$ °K pour l'oxygène, 3790°K pour l'azote et de 2740 °K pour le monoxyde d'azote). Lorsque T/θ_{vib} tend vers zéro, la contribution de la vibration disparaît et quand T/θ_{vib} devient grand alors ε_{vib} tend vers RT .

3.3.4. Contribution de l'excitation électronique

Le développement de $Q_{\text{électro}}$ n'admet pas de formule générale et doit être étudié au cas par cas, en considérant que seuls les premiers niveaux d'énergie ont une population suffisante pour apporter une contribution. (Cette hypothèse est mise en défaut si la température augmente beaucoup) En ne conservant que les deux premiers niveaux d'énergie, on a :

$$Q_{\text{électro}} = g_0 + g_1 e^{-\frac{\theta_1}{T}} \quad (3.17)$$

Et on obtient pour l'énergie spécifique :

$$\varepsilon_{\text{électro}} = R\theta_1 \frac{\left(\frac{g_1}{g_0}\right) e^{-\frac{\theta_1}{T}}}{1 + \left(\frac{g_1}{g_0}\right) e^{-\frac{\theta_1}{T}}} \quad (3.18)$$

La valeur correspondante de C_V s'annule à la fois pour T/θ_1 petit et grand et prend son maximum pour $T/\theta_1 \approx 0.4$. Pour les composantes de l'air, on peut écrire :

$$\begin{aligned} Q_{\text{électro}}^{N_2} &= 1 \\ Q_{\text{électro}}^{O_2} &= 3 + 2e^{-\frac{11390}{T}} \\ Q_{\text{électro}}^{NO} &= 2 + e^{-\frac{174}{T}} \\ Q_{\text{électro}}^N &= 4 \\ Q_{\text{électro}}^O &= 5 + 3e^{-\frac{228}{T}} + e^{-\frac{326}{T}} \approx 5 + 4e^{-\frac{270}{T}} \end{aligned} \quad (3.19)$$

On voit ainsi que la contribution pour l'oxygène diatomique prend son maximum vers 4500°K et que pour le monoxyde d'azote le maximum intervient vers 70 °K. Le monoxyde d'azote aura donc tendance à être plus facilement excité ou ionisé que l'oxygène diatomique [9]. Lorsque la fonction de partition est constante, il n'y a aucune contribution à l'énergie totale. L'expression électronique est souvent négligée en pratique.

3.3.5. Autres contributions

Le modèle considéré ici assimilait les molécules à des oscillateurs harmoniques. Pour tenir compte des effets d'anharmonicité et aussi du couplage entre la rotation et la vibration (ces deux effets sont du même ordre de grandeur), on peut ajouter deux contribution à l'énergie totale $\epsilon_{anharmo}$, $\epsilon_{rot-vib}$

3.4. Relation entre l'énergie et la température

Nous allons utilisé dans cette étude deux modèles pour la représentation thermodynamique :

- Un modèle simplifié prenant en compte la translation, la rotation et la vibration
- Un modèle tenant compte de l'ensemble des contributions, où la relation entre l'enthalpie et la température est donnée sous forme de polynôme ;

Pour le premier modèle, on peut écrire pour chaque espèce :

$$\begin{aligned}
 e_I &= \frac{5}{2} R_I T + \frac{R_I \theta_{VT}}{e^{\frac{\theta_{VT}}{T}} - 1} + e_I^0 && \text{pour molécule} \\
 e_I &= \frac{3}{2} R_I T + e_I^0 && \text{pour les atomes} \\
 C_{VI} &= \frac{5}{2} R_I + \frac{R_I \theta_{VI}^2 e^{\frac{\theta_{VI}}{T}}}{T^2 \left(e^{\frac{\theta_{VI}}{T}} - 1 \right)^2} && \text{pour les molécules} \\
 C_{VI} &= \frac{3}{2} R_I && \text{pour les atomes}
 \end{aligned}
 \tag{3.20}$$

Avec $C_{PI} = C_{VI} - R_I$ et où $R_I = R/M_I$, $R = kN$ (N = nombre d'Avogadro) et M_I est la masse molaire de l'espèce I. L'énergie de formation à 0°K est notée e_I^0

Sous l'hypothèse d'un mélange idéal, l'énergie interne du mélange est égale à la somme des énergies internes de chaque espèce. Cette propriété, à ne pas confondre avec la propriété des gaz parfait des constituants du mélange, est liée à l'absence de forces d'interaction entre les molécules différentes, (la propriété de gaz parfait est liée à l'absence des forces d'interactions entre les molécules identiques). On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \rho e &= \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I \\ &= \sum_{\text{atomes}} \frac{3}{2} R_I \rho_I T + \sum_{\text{molécules}} \rho_I \left(\frac{5}{2} R_I T + \frac{R_I \theta_{VI}}{\frac{\theta_{VI}}{T} - 1} \right) + \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I^0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Les valeurs de M_I , θ_{VI} , et e_I^0 sont tabulés en annexe.

Dans le second modèle, les expressions des enthalpies partielles h_I et des chaleurs spécifiques à pression constante C_{PI} sont obtenues à partir de représentations polynomiales (qui permettent d'éviter le calcul des termes exponentiels présents dans les contributions dues à la vibration et à l'excitation électronique). Leurs coefficients sont déterminés par interpolation à partir des données des tables de Balakrishnan [12]. On a alors :

$$C_{PI} = R_I (a_{1I} + a_{2I} T + a_{3I} T^2 + a_{4I} T^3 + a_{5I} T^4) \quad (3.22)$$

$$h_I = R_I \left(a_{1I} T + \frac{a_{2I}}{2} T^2 + \frac{a_{3I}}{3} T^3 + \frac{a_{4I}}{4} T^4 + \frac{a_{5I}}{5} T^5 + a_{6I} \right)$$

Les valeurs des coefficients a_{kl} seront indiquées dans une annexe. Pour une meilleure représentation des données, deux jeux de valeurs seront utilisés suivant que la température est inférieure ou supérieure à 5000°K. Les expressions de C_{VI} et e_I sont ensuite construites à partir de :

$$C_{VI} = C_{PI} - R_I \quad \text{et} \quad e_I = h_I - R_I T \quad (3.23)$$

On obtient ainsi l'énergie pour le mélange par la sommation :

$$\rho e = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I \quad (3.24)$$

Pour les deux modèles, la détermination de la température à partir de l'énergie est obtenue à l'aide d'un processus itératif. En l'occurrence, une méthode de Newton sera employée.

Enfin, l'énergie totale du mélange est obtenue en ajoutant l'énergie interne et l'énergie cinétique :

$$E = \rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \quad (3.25)$$

3.5. Equation de l'état

La loi de Dalton permet de déterminer la pression totale du mélange :

$$P = \sum_{I=1}^{ns} P_I \quad (3.26)$$

Où P_I est la pression partielle de l'espèce I , qui vérifie la relation du gaz parfait :

$$P_I = \rho_I R_I T \quad (3.27)$$

On obtient ainsi pour la pression totale :

$$P = \left(\sum_{I=1}^{ns} \rho_I R_I \right) T \quad (3.28)$$

Chapitre 4

4. Termes de diffusion

Le transport par diffusion est un effet au niveau macroscopique de la non uniformité (vitesse, température, composition chimique) de l'écoulement. Au cours de leur mouvement, les molécules transportent les propriétés de leur région d'origine et les transmettent aux autres molécules par l'intermédiaire des collisions. Ce phénomène de diffusion se traduit au niveau macroscopique par la contrainte visqueuse (transfert de quantité de mouvement), la conductivité (transfert de chaleur ou d'énergie) et la diffusion massique (transfert de masse). Les flux de diffusion sont alors reliés aux gradients de grandeurs macroscopiques par les coefficients de transport que l'on obtient par la théorie cinétique des gaz. D'après cette théorie, toutes les propriétés d'un gaz dilué peuvent être représentées par une fonction de distribution liée aux variables d'espace, de temps et de vitesse. Cette fonction de distribution est la solution des équations intégro - différentielle connue sous le nom d'équation de Boltzmann.

4.1. Flux de diffusion massique

Le flux de diffusion d'une espèce I s'écrit sous sa forme vectorielle :

$$\vec{Q}_I = \rho_I \vec{u}_{DI} = \sum_{K \neq I} \rho \frac{M_I M_K}{M^2} D_{DK} \vec{d}_K - D_K^T \frac{1}{T} \vec{\text{grad}} T \quad \text{avec } I, K = 1, \dots, N \quad (4.1)$$

$$\vec{d}_K = \vec{\text{grad}} \gamma_K + \gamma_K \left(1 - \frac{M_K}{M} \right) \frac{1}{P} \vec{\text{grad}} P$$

Où D_{IK} est le coefficient de diffusion polynaire de l'espèce I dans l'espèce K . D_K^T est le coefficient de diffusion thermique. $M = \left(\sum_{I=1}^{ns} C_I / M_I \right)^{-1}$ est la masse molaire moyenne du mélange. $C_I = \rho_I / \rho$ la fraction massique de l'espèce I et $\gamma_I = C_I (M / M_I)$ sa fraction molaire. Le premier terme dans Q_I représente l'homogénéisation du mélange par la diffusion due aux gradients de concentration des espèces (composition chimique), le second terme est appelé « effet Soret » est représente grossièrement la migration des particules lourdes vers les régions froides et les particules légères vers les régions chaudes à cause des gradients de température. Ce dernier (qui traduit les conséquences

de la diffusion thermique) est un effet de second ordre qui apparaît à haute température, il est souvent négligé.

Pour un mélange binaire et en négligeant de plus la différence engendrée par les gradients de pression, le flux de diffusion massique vérifie la loi de Fick :

$$\rho_1 \overrightarrow{u_{D1}} = -\rho D_{12} \overrightarrow{\text{grad}C_1} \quad (4.2)$$

Où D_{12} est le coefficient de diffusion binaire. Dans une approche de type couche limite le gradient de pression selon la normale à la paroi est effectivement nul. Cette hypothèse est seulement approximativement vérifiée dans les autres cas.

L'approximation du mélange binaire peut être utilisée pour l'air composé des cinq espèces usuelles (N_2 , O_2 , NO , N , O). On peut en effet, séparer les composants en deux ensembles ; les molécules qui ont approximativement la même masse et le même diamètre et les atomes qui ont aussi sensiblement la même masse et le même diamètre. L'air est ainsi considéré comme un mélange binaire de particules lourdes (molécules) et légères (atomes).

4.2. Tenseur des contraintes visqueuses

En notant ici , pour simplifier l'exposé x_i (resp x_j) la direction x (resp y) et u_i (resp u_j) la vitesse dans la direction x_i (resp x_j) , le tenseur des contraintes visqueuses s'écrit pour les équation de Navier – Stokes :

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \left(\sum_{k=1}^2 \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right) \quad (4.3)$$

Où μ est la viscosité qui intervient dans le phénomène de cisaillement de l'écoulement et δ_{ij} représente le symbole de Kronecker.

4.3. Flux de chaleur

Le flux de chaleur pour un mélange s'écrit sous forme vectorielle :

$$\vec{\phi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}T} + \sum_{l=1}^{ns} h_l \overrightarrow{Q}_l - RT \sum_{l=1}^{ns} \frac{D_K^T}{\gamma_l M_l} \overrightarrow{d}_l \quad (4.4)$$

Dans cette formule, le premier terme représente le flux de chaleur qui traduit la contribution des gradients de température, c'est la loi de Fourier . Le second terme représente le transport d'énergie par le flux de diffusion massique des espèces. Le troisième terme est appelé l'effet Dufour et est le réciproque de l'effet Soret dans l'expression des flux de diffusion massique des espèces. Rappelons que l'effet Soret est directement lié au gradient de température, Tandis que l'effet Dufour est lié au gradient de concentration des espèces λ est la conductibilité thermique du gaz.

En négligeant l'effet Dufour et en admettant la loi de Fick pour le flux de diffusion massique , on trouve :

$$\vec{\phi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}T} - \rho D_{12} \sum_{l=1}^{ns} h_l \overrightarrow{\text{grad}C}_l \quad (4.5)$$

4.3.1. Nombre sans dimension

On peut introduire maintenant les nombres sans dimension de Prandtl, Schmidt et de Lewis :

$$\begin{aligned} \text{Pr} &= \frac{\text{frottement}}{\text{Conduction}} = \frac{\mu C_{pf}}{\lambda} \\ S &= \frac{\text{frottement}}{\text{Diffusion}} = \frac{\mu}{\rho D_{12}} \\ Le &= \frac{\text{Diffusion}}{\text{Conduction}} = \frac{\rho D_{12} C_{pf}}{\lambda} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Où $C_{pf} = \sum_{I=1}^{ns} C_I C_{pI}$ est la chaleur spécifique figée à pression constante. Le nombre de Prandtl qui indique l'ordre de grandeur relatif des effets thermiques et visqueuse, sa valeur peut être considérer proche de celle de l'air non dissocié, soit 0.725 jusqu'à des température de l'ordre de 5000°K environ, à l'équilibre chimique, si on considère la loi de Fick pour la diffusion massique des espèces, on peut former un second paramètre qui compare les effets diffusifs au effets visqueux et qui est le nombre de Schmidt S . Quand au nombre de Lewis Le , il traduit le rapport des effets de diffusion et thermique. Sa valeur varie entre 1 et 1.4 pour l'air, néanmoins dans certains travaux rencontrés dans la littérature la valeur de 1.2 donne de bons résultats pour le calcul du flux de chaleur pariétaux. Pour un gaz parfait sa valeur est nulle.

A l'aide de ces nombres sans dimension, nous pouvons exprimer le flux de diffusion massique ainsi que le flux de chaleur sous une forme plus compacte :

$$\vec{Q}_I = \frac{\mu Le}{\text{Pr}} \vec{\text{grad}} C_I \quad (4.7)$$

$$\vec{\phi} = -\frac{\mu}{\text{Pr}} \left(C_{pf} \vec{\text{grad}} T + Le \sum_{I=1}^{ns} h_I \vec{\text{grad}} C_I \right) \quad (4.8)$$

Afin d'écrire maintenant le flux de chaleur sous la forme de gradients des variables thermodynamiques, on rappelle les définitions des enthalpies partielles et totales (sous l'hypothèse d'un mélange idéal).

$$h_I = \int C_{pI}(\tau) d\tau + e_I^0 \quad \text{et} \quad h = \sum_{I=1}^{ns} C_I h_I \quad (4.9)$$

qui conduisent à :

$$\sum_{I=1}^{ns} h_I \vec{\text{grad}} C_I = \vec{\text{grad}} h - C_{pf} \vec{\text{grad}} T \quad (4.10)$$

le flux de chaleur a alors pour expression :

$$\vec{\phi} = -\frac{\mu}{Pr} \left[(1 - Le) C_{pf} \overrightarrow{gradT} + Le \overrightarrow{gradh} \right] \quad (4.11)$$

Enfin, on peut remarquer que si les nombres de Prandtl et de Lewis sont supposés constants, seule la loi de viscosité est nécessaire pour déterminer le flux de diffusion massique et le flux de chaleur. Et comme les équations de bilan des espèces vont alourdir le temps de calcul à cause des termes de production qui vont les rendre instables, l'une des possibilités à envisager pour essayer de stabiliser ces équations est de simplifier leur termes de diffusion en admettant un seul coefficient de diffusion entre les espèces et en négligeant bien sur et toujours l'effet Soret lequel nous ramènera à la loi de Fick pour tout le mélange.

4.4. Coefficient de transport

4.4.1. Viscosité

Pour des températures dépassant 4000 °K , entre les lois de Hirschfelder , de Wilke et de Straub , seul celle de Sutherland que nous rappelons ci-dessous , conduit à des erreurs de plus de 10 %.

$$\mu = \mu_0 \sqrt{\frac{T}{T_0} \frac{1 + \frac{S}{T_0}}{1 + \frac{S}{T}}} \quad (4.12)$$

Où $\mu_0 = 1.1711 \times 10^{-5} Pl, S = 1110.4^\circ K, T_0 = 273.15^\circ K$.Nous avons choisi d'utiliser ici la loi de Wilke qui donne de bien meilleurs résultats [42].out en restant simple a mettre en œuvre .La viscosité du mélange se déduit de la viscosité des espèces par une relation ne faisant intervenir que les fractions massiques et les masses molaires. Pour chaque espèce la viscosité est donnée par le modèle de Blottner [18].

$$\mu_l = 0.1 \exp \left[\left(A_l^\mu \log T + B_l^\mu \right) \log T + C_l^\mu \right] \quad (4.13)$$

Les constantes A_l^μ, B_l^μ et C_l^μ sont données en annexe A.2.Ce modèle donne des résultats satisfaisants jusqu'à 10 000°K, ce qui est suffisant pour les régions où les effets de viscosité sont importants , la viscosité du mélange se calcule selon la formule de Wilke [148] :

$$\mu = \sum_{l=1}^{ns} \mu_l \frac{C_l}{M_l} \frac{1}{\sum_{k=1}^{ns} \frac{C_k}{M_k} \frac{\left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_k} \left(\frac{M_k}{M_l} \right)^{1/4}} \right)^2}{\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_l}{M_k} \right)}}} \quad (4.14)$$

Au dessus de 7500°K le modèle de Wilke est mis en défaut tandis que le modèle d'Armaly et Sutton [7] est en accord avec les résultats donnés par Yos [166] jusqu'à plus de 15 000°K est qui consiste à prendre pour la seconde formule de la viscosité du mélange :

$$\mu = \sum_{I=1}^{ns} \frac{\mu_I}{1 + \sum_{k=1}^{ns} \frac{C_k}{M_k} \frac{M_I}{C_I} \frac{M_I}{M_I + M_k} \left(\frac{5}{3A_{Ik}^*} + \frac{M_k}{M_I} \right) \Phi_{Ik}} \quad (4.15)$$

Avec

$$\Phi_{Ik} = \sqrt{\frac{M_k}{8(M_I + M_k)}} \left(F_{Ik}^* + B_{Ik}^* \sqrt{\frac{\mu_I}{\mu} \left(\frac{M_k}{M_I} \right)^{1/4}} \right)^2 \quad (4.16)$$

Les constantes $A_{Ik}^* = 1.25$, $B_{Ik}^* = 0.78$ et $C_{Ik}^* = 1.00$ comme on pourra noter que le modèle de Wilke est équivalent à prendre $A_{Ik}^* = 1.25$, $B_{Ik}^* = 1.00$ et $C_{Ik}^* = 1.00$.

4.4.2. Conductivité

la détermination de la conductivité du mélange est faite en séparant les contributions de translation et des degrés de liberté internes .

Contribution de la translation

Pour un gaz formé de molécules qui n'ont pas de degrés de liberté interne, le coefficient de conductibilité thermique est proportionnel au coefficient de viscosité parce que seul le mouvement de translation – agitation intervient. Donc pour chaque espèce, la contribution de la translation peut s'écrire [63] :

$$\lambda_{trI} = \frac{5}{2} \mu_I C_{VI} \quad (4.17)$$

Où C_{VI} est la chaleur spécifique à volume constant par unité de masse .on posant :

$$C_{VI} = \frac{3}{2} \frac{R}{M_I} \text{ tel que } R_I = \frac{R}{M_I} \text{ alors on obtient :}$$

$$\lambda_{trI} = \frac{15}{4} \mu_I R_I \quad (14.18)$$

La part de la translation dans la conduction du mélange s'obtient alors suivant la formule :

$$\lambda_{tr} = \sum_{I=1}^{ns} \frac{\lambda_{trI}}{1 + \sum_{k=1}^{ns} \frac{C_k}{M_k} \frac{M_I}{C_I} \frac{M_k M_I}{4(M_I + M_k)^2} \left(15 \frac{M_I}{M_k} + 5 \frac{M_k}{M_I} + 8A_{Ik}^* \right) \Phi_{Ik}} \quad (14.19)$$

Contribution des degrés de liberté interne

La contribution des degrés de liberté interne est donnée pour chaque espèce par :

$$\lambda_{\text{int } I} = \rho \Delta \left(C_{VI} - \frac{3}{2} R_I \right) \quad (14.20)$$

Où Δ est le coefficient de self diffusion. le rapport $\frac{\rho \Delta}{\mu_I}$ est quasiment constant et proche de l'unité .D'après Hirschfelder on peut écrire :

$$\frac{\rho \Delta}{\mu_I} = \frac{6}{5} A_{Ik}^* \quad (14.21)$$

La valeur unité de ce rapport donne l'approximation d'Eucken. Dans ce cas avec $A_{Ik}^* = 1.25$, on obtient une valeur de 1.5 .A basse températures, le nombre de Prandtl qui en découle est alors estimé ($Pr = 0.66$) par rapport à la valeur usuelle ($Pr = 0.725$). On obtient ensuite la contribution des degrés de liberté internes à la conductivité du mélange en suivant la formule :

$$\lambda_{\text{interne}} = \sum_{I=1}^{ns} \frac{\lambda_{\text{interne } I}}{1 + \sum_{k=1}^{ns} \frac{C_k}{M_k} \frac{M_I}{C_I} \Phi_{Ik}} \quad (14.22)$$

Enfin la conductivité du mélange est la somme des deux contributions $\lambda = \lambda_{\text{interne}} + \lambda_{tr}$. La conductivité thermique pour un gaz monoatomique suit une première approximation [63] la relation (14.18) .On peut calculer le nombre de Prandtl associé par :

$$Pr = \frac{4}{15} \frac{C_{PI}}{R_I} \quad (14.23)$$

On obtient effectivement une bonne approximation pour un gaz monoatomique ($C_{PI} = \frac{5}{2} R_I$ donne un nombre de Prandtl $\frac{2}{3}$) mais pour un gaz diatomique lequel $C_{PI} = \frac{7}{2} R_I$, le nombre de Prandtl ainsi obtenu vaut 0.93 , ce qui est loin de la valeur usuelle de 0.725 et une autre relation doit être utilisée .Eucken a proposé de séparer l'énergie moléculaire en deux parties : l'énergie du mouvement de translation dont le transport serait similaire à celui d'un gaz monoatomique et une énergie associée à la structure interne [142]. Cette approche conduit à l'expression :

$$\lambda_I = \mu_I \left(C_{VI} - \frac{9}{4} R_I \right) \quad (4.24)$$

On obtient les mêmes résultats que précédemment pour un gaz monoatomique mais le nombre de Prandtl est maintenant égal à 0.737 pour un gaz diatomique. Cette relation est de plus avantageuse pour être adopter dans ce mémoire. La conductivité de mélange est aussi donnée par la formule de Wilke :

$$\lambda = \sum_{I=1}^{ns} \lambda_I \frac{C_I}{M_I} \frac{1}{\sum_{k=1}^{ns} \frac{C_k}{M_k} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_I}{\mu_k}} \left(\frac{M_k}{M_I} \right)^{1/4} \right)^2} \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_I}{M_k} \right)} \quad (4.25)$$

Coefficient de diffusion binaire (polynaire)

Pour appliquer la loi de Fick, nous avons assimilé l'air à un mélange binaire de particules lourdes et dominantes (molécules) et légères (atomes). D'autre part, le modèle simplifié de calcul des coefficients de diffusion développés par Straub, s'appuie sur la même idée [122,121]. Le coefficient de diffusion binaire pour l'air a donc été assimilé dans ce cas au coefficient de diffusion binaire D_{AM} entre atome et molécule par Straub. Il est déterminé à l'aide de la formule :

$$D_{AM} = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2k^3 N}{\pi} \frac{M_A + M_M}{M_A M_M} \frac{T^{3/2}}{P}} \frac{1}{\langle \Omega_{AM} \rangle^{(1.1)}} \quad (4.26)$$

Avec $\langle \Omega_{AM} \rangle^{(1.1)} = 8.510^{-20} (T/1000)^{-0.26}$, et où k est la constante de Boltzmann, N le nombre d'Avogadro, M_M la masse molaire moyenne des molécules (resp. des atomes) .A température ambiante (300 °K) et en prenant un nombre de Prandtl de 0.725, on obtient un nombre de Lewis de 1.4.

Dans ce travail nous avons supposé que le nombre de Lewis était constant et égal à 1.2. Le coefficient de diffusion binaire D_{I2} se déduit donc de la valeur du nombre de Lewis

Nous faisons remarquer que le coefficient binaire représente l'effet de diffusion dû aux gradients de concentrations dans un mélange qui est formé de deux espèces et la théorie cinétique donne la formule des coefficients de diffusion binaire en fonction des données thermodynamiques et des intégrales de collision [63]

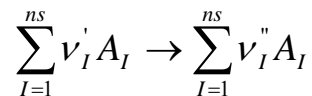
Quant au coefficient de diffusion polynaire, il représente l'effet de diffusion des espèces dû aux gradients de concentrations lorsqu'il s'agit d'un mélange formé de plusieurs espèces.

Chapitre 5

5. Cinétique chimique

5.1. Présentation

la détermination des taux de production chimique fait appel à la fois à la cinétique chimique (théorie des collisions) et aux résultats expérimentaux .



Où les A_I représentent les espèces chimiques, ν_I' (resp. ν_I'') les coefficients stoechiométriques pour les réactifs (resp. : les produits) .Si l'espèce A_I n'intervient pas comme réactif (resp. comme produit) on posera $\nu_I' = 0$ (resp. $\nu_I'' = 0$)

L'expérience a montré que le taux de formation d'un produit peut s'écrire dans la plus part des cas :

$$\frac{dm}{dt} = \nu_I'' K_c(T) \underbrace{n_1^{z_1} n_2^{z_2} n_3^{z_3} \dots}_{\text{produit sur les réactifs}} \quad (5.1)$$

Où n_I désigne le nombre de moles de l'espèce I par unité de volume et $K_c(T)$ est une fonction de la température , appelée vitesse de réaction . De même le taux de disparition d'un réactif peut s'écrire :

$$\frac{dn_I}{dt} = -\nu_I' K_c(T) \underbrace{n_1^{z_1} n_2^{z_2} n_3^{z_3} \dots}_{\text{produit sur les réactifs}} \quad (5.2)$$

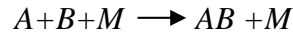
Les exposants z_I peuvent être entiers ou rationnels et ne sont pas forcément égaux aux coefficients stoechiométriques, sauf dans le cas de réactions élémentaires.

La cinétique chimique permet de déterminer les vitesses de réactions $K_c(T)$ et les exposants z_I en étudiant les mécanismes de collision donnant lieu à des réactions chimiques .Toute collision ne donne pas lieu au déclenchement d'une réaction chimique .car plusieurs conditions sont requises. Tout d'abord , l'énergie prise en jeu par la collision , doit être supérieur à l'énergie mise en jeu lors d'une collision simple [142] , l'orientation relative des molécules durant le choc a également une influence sur l'efficacité de la collision (facteur stérique) . Dans le plus part des cas, l'énergie

d'activation et le facteur stérique ne peuvent être déterminés par la théorie et dans ces cas précis des valeurs expérimentales sont utilisées.

On étudie principalement deux types de réactions élémentaires que l'on distingue par le nombre de particules qu'elles mettent en jeu.

1. les mécanismes binaires dont la réaction de dissociation : $AB+M \longrightarrow A+B+M$ est un exemple simple
2. Les mécanismes ternaires illustrés par la réaction de recombinaison :



Les réactions impliquant plus de trois particules sont rares, la molécule M qui intervient dans les réactions n'est pas modifiée chimiquement, mais agit comme catalyseur. Dans le premier cas, elle fournit à la molécule AB l'énergie nécessaire à la dissociation par l'intermédiaire de la collision. Dans le second cas, elle permet d'évacuer le surplus d'énergie.

Une réaction pouvant avoir lieu dans les deux sens, on adoptera la notation



Pour une réaction de dissociation par exemple, de telle sorte que le sens direct (de gauche à droite) corresponde à une réaction endothermique (qui a besoin d'énergie d'activation) et le sens inverse à une réaction exothermique (qui libère de l'énergie). On notera K_d la vitesse de la réaction directe et K_i celle de la réaction inverse.

A partir de la distribution de Boltzmann et de la théorie cinétique pour laquelle la vitesse de réaction est égale à la fréquence de collision des molécules ayant une énergie plus grande que celle de l'énergie d'activation, il a été montré expérimentalement que la vitesse K_d pouvait s'écrire :

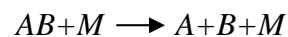
$$K_d = AT^B \exp\left(\frac{-E_0}{kT}\right) \quad (5.3)$$

Où A , B et E_0 sont des constantes dépendant de la réaction considérée mais indépendantes de la température et où k est la constante de Boltzmann. Cette loi est une extension de la célèbre formule d'Arrhenius, du nom du savant suédois qui lui donna une interprétation théorique en 1889 :

$$K = C \exp\left(\frac{-E_A}{kT}\right) \quad (5.4)$$

Où C est une constante et E_A l'énergie d'activation.

La détermination de la vitesse de réaction inverse est généralement obtenue à partir de la constante d'équilibre. Ainsi pour la réaction :



Le taux de production de l'espèce A est :

$$\frac{dn_A}{dt} = \left(\frac{dn_A}{dt} \right)_d + \left(\frac{dn_A}{dt} \right)_i = K_d n_{AB} n_M - K_i n_A n_B n_M \quad (5.5)$$

A l'équilibre $dn_A/dt = 0$, d'où :

$$\frac{K_d}{K_i} \frac{n_A n_B n_M}{n_{AB} n_M} = \frac{n_A n_B}{n_{AB}} = K_{equilibre} \quad (5.6)$$

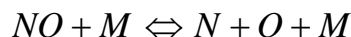
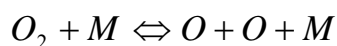
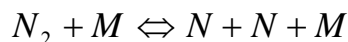
Où $K_{equilibre}$ est la constante d'équilibre. Celle-ci étant liée aux propriétés thermodynamiques du gaz, sa détermination est plus simple et on utilise généralement la relation (5.6) pour calculer la vitesse de réaction inverse.

5.2. Modèle chimique pour l'air

On considère l'air à l'état normal formé d'azote et d'oxygène moléculaires. On néglige les espèces comme l'Argon, le dioxyde de carbone ou la vapeur d'eau à cause de leur participation relativement faible. Pour l'air dissocié, on a pris en compte des espèces atomiques et moléculaires diatomiques. Avec ces hypothèses, le mélange peut contenir cinq espèces qui sont l'azote et l'oxygène moléculaires et atomiques et le monoxyde d'azote (N_2, O_2, N, O, NO).

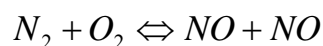
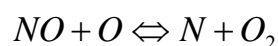
On admettant que les réactions les plus probables sont celles à deux corps (binaires), le jeu de réactions chimiques à utiliser, compte tenu de cinq espèces est formé de :

- Réactions de dissociation des molécules ou de recombinaison des atomes :



Où M représente l'une quelconque des espèces considérées soit $M = N_2, O_2, N, O, ou NO$. Qui peuvent rentrer en collision avec l'espèce principale de la réaction étudiée et servent aux échanges énergétiques pour la réalisation de la réaction

- Trois réactions de formation du monoxyde d'azote :



Dont les deux premières sont appelées réactions d'échange et la dernière réaction de formation directe de NO à partir de l'azote et de l'oxygène moléculaires est sujette à caution et sa contribution faible.

Finalement, avec cinq espèces, on obtient ainsi dix-sept réactions possibles, pour lesquelles les vitesses de réactions associées doivent être déterminées.

5.2.1. Détermination des vitesses de réaction

Méthodes de mesure

La plupart des méthodes de mesure des taux de production des réactions de dissociation se basent sur l'augmentation de la masse volumique liée à ce processus. En effet, cette réaction est endothermique et diminue donc la température, comme la pression est peu affectée par les processus chimiques, la masse volumique augmente. Un des problèmes liés à ces mesures est de faire la part de l'augmentation due à l'excitation vibrationnelle et celle due à la chimie car les phénomènes agissent dans le même sens. On considère généralement que la vibration est pleinement excitée avant que la chimie commence ce qui permet de représenter le fluide par une unique température, toutefois, il existe des modèles prenant en compte le déséquilibre vibrationnel, comme celui proposé par Park [97,96].

Lorsque la masse volumique est faible, on peut en mesurer les variations par l'intermédiaire d'un faisceau d'électron qui traverse le gaz. La masse du flux d'électron qui parvient à l'anode permet de déduire la fraction absorbée par le gaz et de déterminer alors la masse volumique du gaz. On peut aussi s'intéresser à l'intensité du rayonnement émis au passage du faisceau qui, elle aussi, est proportionnelle à la masse volumique. Quand la masse volumique devient trop forte, le faisceau est complètement absorbé et ces techniques sont abandonnées.

Pour de fortes masses volumiques, on utilise plutôt l'interférométrie, les variations de masse volumique sont détectées par la variation de la phase du faisceau lumineux traversant le gaz. En effet, tout comme la masse volumique, la phase est proportionnelle à $(n-1)$ où n est l'indice de réfraction du milieu. On combine alors le faisceau ayant traversé le milieu avec un faisceau de référence et l'on étudie les franges d'interférence qui apparaissent. L'épaisseur de chaque raie est proportionnelle à la différence de phase entre les deux faisceaux et donne ainsi l'accès à la masse volumique.

Enfin pour mesurer la masse volumique partielle d'un élément donné, on peut aussi étudier ses spectres d'absorption ou d'émission; en général, les réactifs et les produits ont des caractéristiques optiques différentes, l'oxygène moléculaire par exemple, absorbe dans le domaine des longueurs d'onde inférieures à 175 nm de façon quasi continue, tandis que l'oxygène atomique absorbe seulement à des longueurs d'onde discrètes (130, 115 et 103 nm). En choisissant une valeur pour la longueur d'onde différente des trois valeurs citées pour l'oxygène atomique, on peut mesurer la masse volumique de l'oxygène moléculaire.

Une caractéristique essentielle du monoxyde d'azote est l'émission dans le domaine infrarouge à 5.3 μm environ, la concentration du monoxyde d'azote peut être facilement déterminée par l'intensité de l'émission, Cette méthode est utilisée pour déterminer les vitesses des réactions d'échange par exemple.

Incertitudes des mesures

Il existe plusieurs causes d'incertitude sur la détermination des constantes de réaction [98]. L'une d'elles a déjà été mentionnée, c'est l'influence de la vibration. Une deuxième concerne le domaine de températures couvert par les expériences, pour la dissociation de l'oxygène par exemple, la plage de température s'étend de 2000 °K à 7000°K, pour celle de l'azote, elle atteint les 15 000 °K. Les constantes de réaction seront déduites des résultats expérimentaux par un ajustement des constantes A , B et E_0 intervenant dans la relation (5.3). Les valeurs obtenues sont ensuite utilisées dans des gammes de température beaucoup plus larges pouvant aller jusqu'à 25 000 °K voir plus. On n'est alors plus sûr de la validité des expériences. Un dernier problème qui peut être encore pris en compte est la possibilité de réactions simultanées. Ainsi, la dissociation du monoxyde d'azote s'accompagne par exemple des réactions d'échange. La détermination de la constante d'une réaction donnée est dans ce cas fort difficile.

Modèle de Park

Nous allons opter dans ce travail pour l'utilisation principalement du modèle de Park [97] avec une température unique. C'est en effet un modèle largement utilisé, par ailleurs ce qui facilite les comparaisons des résultats. Les vitesses de réaction directes sont données par la relation :

$$K_d = A_c T^B \exp\left(\frac{-\theta_c}{kT}\right) \quad (5.7)$$

Et les vitesses de réaction inverses se déduisent des constantes d'équilibre par la relation (5.6) où K_{eq} est égale à :

$$K_{eq}(T) = 10^{6(\sum v' - \sum v'')} \exp(A_1^c + A_2^c Z + A_3^c Z^2 + A_4^c Z^3 + A_5^c Z^4) \quad (5.8)$$

Avec $Z=10000/T$, T en kelvin. Bien que les coefficients A_k^c aient été déterminés par corrélation avec les résultats spectroscopiques obtenus pour les températures de 1000 °K à 16 000 °K, le domaine de validité de l'expression de K_{eq} est défini pour des températures comprises entre 500 °K et 50 000 °K [97]. Les valeurs numériques de A_c , B_c et θ_c et des A_k^c seront données en annexes.

En vue de comparaisons, nous pouvons aussi utilisé d'autres modèles [Gardiner, Straub, NASA, Kang et Westley] dont les vitesses directes sont toujours données par des relations similaires à (5.7) et dans tous les cas les vitesses inverses seront déduites de la constantes d'équilibre (5.8).

5.2.2. Forme générale des taux de production

La forme générale des taux de production est obtenue en généralisant la formule (5.5), tout d'abord à une réaction :

$$\frac{dn_I}{dt} = (v' - v'') \left(K_i \prod_j n_j^{v_j''} - K_d \prod_j n_j^{v_j'} \right) \quad (5.9)$$

Où $n_I = \rho_I / M_I$, puis, le taux de production total ω_I de l'espèce I s'obtient en faisant la somme sur toutes les réactions possibles

$$\omega_I = M_I \sum_r (v_{Ir}' - v_{Ir}'') \left(K_{ir} \prod_j n_j^{v_{jr}''} - K_{dr} \prod_j n_j^{v_{jr}'} \right) \quad (5.10)$$

5.3. Calcul de l'équilibre chimique

Le but est de calculer les concentrations des espèces d'un mélange pour des conditions thermodynamiques données par exemple pour un couple de valeurs de la pression et de la température.

Les concentrations ne sont pas indépendantes. Les éléments chimiques fondamentaux qui forment les espèces doivent être constants. Si le nombre d'éléments est I et le nombre d'espèces est N , les relations de conservation des éléments fondamentaux peuvent être représentées sous la forme générale :

$$\sum_{I=1}^N A_{I,k} x_I = x_k^0 \quad k = 1, L \quad (5.11)$$

Où $A_{I,k}$ est le nombre d'atomes d'élément k participant à la structure de l'espèce I , x_I est le nombre de moles de l'espèce I par unité de masse, x_k^0 est le nombre total de moles par unité de masse de l'élément k à l'état initial, il faut dans ce cas écrire $N-L$ conditions d'équilibre chimique supplémentaires.

- **La minimisation de l'enthalpie libre du mélange.**

En équilibre chimique, à conditions thermodynamique fixées, la composition du mélange s'adapte pour avoir l'état énergétique le plus stable possible ; ceci correspond à l'enthalpie libre minimum. L'enthalpie libre du mélange par masse est $G = \sum_I C_I G_I$. Sa valeur minimum correspond à la composition qui vérifie la condition $\frac{\partial G_I}{\partial C_I} = 0$ tel que $I = 1, N$,

- **L'annulation des productions chimiques**

Le mélange a une composition qui ne varie pas, ce qui entraîne que les productions ou les destructions chimiques doivent être nulles en équilibre chimique. Donc, il faut déterminer la composition qui annule les productions ($\dot{\omega}_I = 0$, $I = 1, N$)

• **La loi d'action de masse**

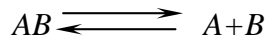
La composition du mélange vérifie la loi d'action de masse, en équilibre chimique. Les constantes d'équilibre des réactions sont calculées avec les conditions thermodynamiques imposées. Donc, il suffit d'écrire la loi d'action de masse pour $N-L$ réactions indépendantes et de trouver la composition correspondante :

$$K_{nr} = \prod_j n_j^{\nu_j'} \left(\frac{P^*}{RT} \right) \exp\left(\frac{A^*}{RT} \right) \quad , r = 1, N - L \quad (5.12)$$

Remarques :

- Les trois méthodes sont équivalentes, elles sont itératives, donc il faut partir d'une composition approchée et tendre vers la solution.
- La méthode de minimisation d'enthalpie libre est la plus générale. Elle ignore les réactions chimiques et est liée directement aux variables thermodynamiques. Du point de vue numérique, elle est la plus stable et la plus rapide. La deuxième méthode, qui est l'annulation des productions, est utile lorsqu'on a en jeu de réactions chimiques pour lequel on connaît les vitesses de réactions directes et inverses, le rapport K_d/K_i peut être légèrement différent de la constante d'équilibre calculée avec les données thermodynamiques.

Si on suppose que la température T et la pression P soient données et calculons la composition d'un mélange comprenant initialement N_A moles de l'espèce A et N_B moles de l'espèce B et pouvant réagir selon la réaction :



Les inconnues du problème sont n_A , n_B et n_{AB} : les nombres de moles respectifs de A, B et AB à l'équilibre. On écrit tout d'abord la loi d'action de masse :

$$K_{eq} = K_{eq}(T) = \frac{n_A n_B}{n_{AB}} \quad (5.13)$$

Où K_{eq} a par exemple l'expression donnée dans la section 5.2.1. Les deux réactions supplémentaires sont obtenues par les relations de conservation atomique :

$$\begin{cases} n_A + n_{AB} = N_A \\ n_B + n_{AB} = N_B \end{cases} \quad (5.14)$$

La donnée de pression totale permet d'accéder aux pressions partielles, aux masses volumiques partielles et ainsi à toutes les grandeurs caractérisant l'écoulement. Le même principe est appliqué ici pour l'air est détaillé en annexe B.

Chapitre 6

6. Conditions aux limites à la paroi

Nous allons rappeler en premier lieu que les conditions dans lesquelles nous allons nous placer seront telles que le nombre de Knudsen soit suffisamment petit pour qu'aucun phénomène de glissement n'apparaisse à la paroi [113,114]

6.1. Conditions pour la vitesse, la pression et la température

Lorsque le glissement n'est pas pris en compte, les conditions aux limites que l'on imposera aux équations s'écriront de façon classique et simple. La condition d'adhérence à la paroi se traduit par :

- L'équation de continuité permet de calculer dans la couche limite le profil de la vitesse perpendiculaire à la paroi. En l'absence du soufflage ou de paroi ablative. Ce se traduit par une vitesse verticale nulle à la paroi
- Pour les équations de quantité de mouvement les composantes de la vitesse, parallèlement à la paroi sont nulles.

$$u = 0 \quad v = 0 \quad (6.1)$$

Par ailleurs, dans cette étude, la paroi est supposée adiabatique ou à température prescrite. Dans le second cas, on impose comme condition aux limites :

$$T = T_p, \quad (6.2)$$

Où T_p est la température de paroi. Les parois considérées ici sont froides, leur température est comprise entre 800 °K et 1500 °K. Si la paroi est adiabatique on utilisera la condition :

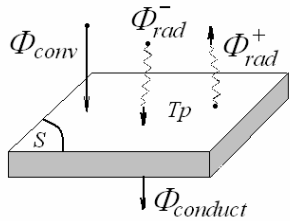
$$\vec{n} \cdot \vec{\phi} = 0, \quad (6.3)$$

Où \vec{n} est la direction normale au corps et $\vec{\phi}$ le flux de chaleur.

Chapitre 6 : CONDITIONS AUX LIMITES A LA PAROI

On peut imposer une distribution de température de paroi, par exemple les températures limites auxquelles peuvent résister les différentes régions de la protection thermique de la navette. Avec cette distribution, on cherchera à évaluer le flux de chaleur que doit supporter le véhicule.

Une seconde possibilité, est de chercher la température d'équilibre de la paroi. Lors de la rentrée de la navette américaine, il a été observé que, pendant une phase importante du vol, la température restait quasiment constante en fonction du temps. On en déduit que la paroi est en équilibre thermique et on peut écrire pour un élément de cette dernière la condition d'équilibre :



$$mC_v = \frac{\partial T_p}{\partial t} = S(\phi_{conv} + \phi_{rad}^- + \phi_{rad}^+ + \phi_{conduct}) \quad (6.4)$$

L'élément a une surface S et une masse m . C_v est sa chaleur spécifique par unité de masse. ϕ_{conv} est le flux de chaleur par convection du fluide à la paroi, $\phi_{conduct}$ est le flux de chaleur par conduction dans l'élément de structure et ϕ_{rad}^- est le flux de chaleur par radiation émis par l'environnement vers la paroi et ϕ_{rad}^+ est le flux de chaleur par radiation émis par la paroi. La température reste constante, donc le membre de gauche est nul. La radiation de l'atmosphère et la radiation de la couche limite sont négligées devant la convection. On peut considérer que la conduction peut être aussi négligée, puisque l'élément est un isolant thermique. Il reste dans ce cas :

$$-\phi_{conv} = \phi_{rad}^+ = \varepsilon \sigma T_p^4 \quad (6.5)$$

Où σ est la constante de Stefan-Boltzmann et ε est l'émissivité de la paroi. On a donc une condition mixte à la paroi.

Les conditions précédentes imposent $ns+2$ relations à la paroi. La relation manquante est obtenue à partir de l'équation de mouvement selon la direction normale à la paroi, pour simplifier l'analyse, nous allons négliger les flux diffusifs dans la direction x que nous allons clarifier plus tard. L'équation s'écrira alors à la paroi :

$$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{1}{Re} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{4}{3} \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \quad (6.6)$$

Où nous avons utilisé des grandeurs sans dimension pour faire apparaître le nombre de Reynolds (voir section 7.2.2). A nombre de Reynolds suffisamment élevé, on peut négliger le terme de droite dans l'équation précédente qui représente une approximation de couche limite, ce qui revient à dire qu'à la paroi la pression pouvait être extrapolée à partir de la condition de type couche limite à savoir :

$$\frac{\partial P}{\partial y} = 0 \quad (6.7)$$

6.2. Catalyse

L'étude de l'échauffement de la paroi est un des points les plus importants pour la conception d'un véhicule hypersonique .Le flux de chaleur est directement lié aux conditions à la paroi ainsi qu'aux variables caractérisant l'écoulement. La paroi du véhicule peut de plus participer aux réactions chimiques par combustion ou ablation. Toutefois, nous allons considérer dans ce travail que des surfaces qui agissent comme catalyseur, c'est-à-dire, qui ne sont pas modifiées par les réactions .Nous savons pertinemment que le pouvoir catalytique de la paroi modifie le flux de chaleur.

6.2.1. Catalycité

Les phénomènes de catalyse agissent essentiellement comme des accélérateurs des réactions chimiques. Le catalyseurs , qui peut aussi bien être dans une phase gazeuse que solide , agit comme partenaire supplémentaire dans la réaction , la paroi peut participer comme corps catalytique aux réactions chimiques qui ont lieu au sein du mélange . Les vitesses des réactions chimiques seront augmentées plus ou moins fortement en fonction de l'intensité de ce phénomène de catalyse hétérogène, sans toutefois, déplacer l'équilibre chimique.

La catalyse hétérogène est un phénomène très complexe, mais qualitativement, on peut faire une description : Le matériau absorbe une partie des espèces qui diffusent vers la surface en leur fournissant des sites inter atomiques, où elles peuvent s'insérer.

Les molécules absorbées réagissent avec d'autres molécules logées dans des sites voisins ou avec des molécules au voisinage de la paroi. A cause de l'agitation thermique les nouvelles espèces formées regagnent la phase gazeuse, qui n'est autre que le phénomène inverse de l'adsorption : la désorption.

En favorisant les réactions chimiques de recombinaison à la paroi, le catalyseur peut augmenter les flux de chaleur pariétaux, car ces réactions sont exothermiques. On recherche donc plutôt, des matériaux faiblement catalytiques. Les parois métalliques constituent en général, des surfaces qui approchent le cas totalement catalytique et les parois en silice ou en verre sont des surfaces que l'on peut considérer comme non catalytiques. Entre ces deux cas limites, les parois existantes sont appelées parois semi catalytiques .L'effet catalytique de la paroi est alors représenté par la loi de la forme :

$$Q_{yl}|_{paroi} = K_I(T)C_{Iparoi} \quad (6.8)$$

Les parois non catalytiques correspondent à des coefficients K_I nuls.

La modélisation la plus simple de la catalyse considère deux types d'interactions entre la paroi et les atomes incidentes :

- La réflexion atomique spéculaire qui ne s'accompagne d'aucune libération d'énergie.
- La capture de l'atome par la paroi

C'est dans ce dernier cas qu'intervient le pouvoir catalytique de la paroi. En effet, l'adsorption (ou capture) de l'atome par la paroi peut nécessiter un temps suffisamment long pour qu'il puisse interagir avec un autre atome absorbé ou avec un atome incident afin de former une molécule. L'effet catalytique de la surface est d'abaisser la barrière d'énergie potentielle donc de modifier l'énergie d'activation et, par ce biais, de favoriser les réactions. Une fois la recombinaison effectuée, la molécule formée est absorbée par la surface, laissant le site libre pour un nouveau cycle.

Pour déterminer le taux de catalyse, on suppose que toute l'énergie libérée par la recombinaison atomique est transmise à la paroi, ce qui ne traduit pas exactement la réalité. Toutefois, il n'existe pas à ce jour de moyen fiable pour déterminer la proportion d'énergie réellement cédée. [114]

Scott [114] introduisit un taux γ_a d'atomes incidents entrant en collision avec la surface et se recombinant. Ce taux dépend de l'espèce atomique considérée, du matériau de surface et de la température. Une paroi est dite totalement catalytique si $\gamma_a=1$, l'autre cas extrême définissant une paroi non catalytique, pour laquelle $\gamma_a=0$.

On peut aussi introduire, par analogie avec le taux de réactions, une constante K_{Pa} associée au taux de recombinaison catalytique telle que :

$$\rho u_{D_{an}} = (\rho C_a)^q K_{Pa} \quad (6.9)$$

Où $u_{D_{an}}$ est la composante selon la normale à la paroi de la vitesse de diffusion de l'atome considéré et q l'ordre de la réaction. Toujours Scott a relié γ_a et K_{Pa} par la relation suivante (avec $q=1$) :

$$K_{Pa} = \frac{2\gamma_a}{\gamma_a - 1} \sqrt{\frac{kT}{2\pi m_a}} \quad (6.10)$$

Pour une paroi non catalytique, on a $\gamma_a=0$, soit $K_{Pa}=0$. La composante normale à la paroi du flux de diffusion massique $\rho u_{D_{an}} = 0$ est alors nulle.

Pour une paroi totalement catalytique $\gamma_a \rightarrow 1$, d'où $K_{Pa} \rightarrow \infty$ il en résulte alors de (6.8) que nécessairement la concentration atomique à la paroi est nulle : $C_{aparo} = 0$. On peut également admettre que : puisque la catalyse accélère les réactions, le gaz se trouve à l'équilibre chimique à la paroi, si celle-ci est catalytique : c'est cette dernière modélisation que nous retiendrons dans ce travail.

6.2.2. Conditions à la paroi pour les concentrations

Dans ce travail nous avons adopté les conditions aux limites suivantes :

- Pour une paroi non catalytique, compte tenu de la loi de Fick pour le flux de diffusion massique : $\partial C_I / \partial n = 0$.
- Pour une paroi totalement catalytique : $C_I = C_{Ieq}$, où l'indice eq indique les grandeurs à l'équilibre chimique.

Chapitre 7

7. Equations Finales

Nous allons maintenant établir le jeu final d'équations à discrétiser. Dans ce chapitre une variable avec astérisque en exposant désigne une variable avec dimension.

7.1. Ecoulement bidimensionnel plan et axisymétrique

Nous donnons ici la forme vectorielle des équations de bilan traitées dans la section 2.1 ,une forme commune aux écoulements bidimensionnels plans et axisymétriques à été adoptée en introduisant un paramètre a , lequel sera nul dans le cas plan et sera égal à 1 en axisymétrique :

Notons par U^* le vecteur des variables principales avec dimension (en fluide visqueux réactifs ce ne sont pas des variables conservatives) , F^* et G^* les flux convectifs dans les directions x et y , \mathcal{P}^* le terme supplémentaire en axisymétrique proportionnel à la pression , F_v^*, G_v^* et H_v^* : les flux diffusifs et S^* : le vecteur des termes sources . Ces vecteurs sont de dimension $ns+3$, où ns est le nombre total d'espèces. Les équations de Navier –Stokes pour un mélange réactif s'écrivent alors :

$$\frac{\partial(y^{*a}U^*)}{\partial t^*} + \frac{\partial(y^{*a}F^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(y^{*a}G^*)}{\partial y^*} + a\mathcal{P}^* = \frac{\partial(y^{*a}F_v^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(y^{*a}G_v^*)}{\partial y^*} + aH_v^* + y^{*a}S^* \quad (7.1)$$

Avec

$$U^* = \begin{pmatrix} \rho_1^* \\ \rho_2^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns}^* \\ \rho^* u^* \\ \rho^* v^* \\ E^* \end{pmatrix} \quad F^* = \begin{pmatrix} \rho_1^* u^* \\ \rho_2^* u^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns}^* u^* \\ \rho^* u^{*2} + P^* \\ \rho^* u^* v^* \\ u^*(E^* + P^*) \end{pmatrix} \quad G^* = \begin{pmatrix} \rho_1^* u^* \\ \rho_2^* u^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns}^* u^* \\ \rho^* u^{*2} + P^* \\ \rho^* u^* v^* \\ u^*(E^* + P^*) \end{pmatrix} \quad \mathcal{P}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \\ -P^* \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$F_v^* = \mu^* \begin{pmatrix} \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_1}{\partial x^*} \\ \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_2}{\partial x^*} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_{ns}}{\partial x^*} \\ \frac{4}{3} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} - \frac{2a}{3} \frac{v^*}{y^*} \\ \left(\frac{\partial u^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right) \\ \frac{1}{Pr} \left((1-Le) C_{pf}^* \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + Le \frac{\partial h^*}{\partial x^*} \right) + u^* \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} - \frac{2a}{3} \frac{v^*}{y^*} \right) \\ + v^* \left(\frac{\partial u^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right) \end{pmatrix}$$

$$F_v^* = \mu^* \begin{pmatrix} \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_1}{\partial y^*} \\ \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_2}{\partial y^*} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{Le}{Pr} \frac{\partial C_{ns}}{\partial y^*} \\ \left(\frac{\partial u^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right) \\ \frac{4}{3} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2a}{3} \frac{v^*}{y^*} \\ \frac{1}{Pr} \left((1-Le) C_{pf}^* \frac{\partial T^*}{\partial y^*} + Le \frac{\partial h^*}{\partial y^*} \right) + u^* \left(\frac{\partial u^*}{\partial y^*} + \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \right) \\ + v^* \left(\frac{4}{3} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2a}{3} \frac{v^*}{y^*} \right) \end{pmatrix}$$

$$H_v^* = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \\ \mu^* \left(\frac{2}{3} \frac{\partial u^*}{\partial x^*} - \frac{2}{3} \frac{\partial v^*}{\partial y^*} - \frac{4}{3} \frac{v^*}{y^*} \right) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S^* = \begin{pmatrix} \omega_1^* \\ \omega_2^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \omega_{ns}^* \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

7.2. Grandeurs caractéristiques de l'écoulement

7.2.1. Temps caractéristiques

Pour étudier les temps caractéristique associés aux différents phénomènes (convection, diffusion, production chimique) intervenant dans le système d'équation (7.1), revenons à l'équation de bilan pour l'espèce I . Pour simplifier l'analyse, nous allons négliger les flux dans la direction x que nous détaillerons plus tard :

$$\frac{\partial \rho_I^*}{\partial t^*} + \underbrace{\frac{\partial(\rho_I^* u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho_I^* v^*)}{\partial y^*}}_{\text{Convection}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial y^*} \left(\rho^* D_{12} \frac{\partial C_I}{\partial y^*} \right)}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\omega_I}_{\text{production}} \quad (7.2)$$

A chacun des termes de convection, diffusion, production chimique, nous pouvons associer un temps caractéristique [36] :

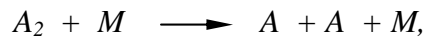
- Convection : $t_\infty^* = L^*/U^*$
- Diffusion : $t_d^* = \delta^{*2}/D_{12}^*$
- Production chimique : $t_p^* = \rho_I^*/\omega_I^*$

Où L^* et U^* sont des grandeurs caractéristiques de la géométrie et de l'écoulement (par exemple, le rayon du nez et la vitesse à l'infini amont), δ^* l'épaisseur de la couche limite des espèces [36]. L'ordre de grandeurs de δ^* peut être obtenu en identifiant les temps caractéristiques de la convection sur une longueur L^* , est aussi transportée par diffusion sur une longueur δ^* pendant le même temps, soit $t_\infty^* = t_d^*$. On obtient :

$$\frac{\delta^*}{L^*} = \sqrt{\frac{D_{12}^*}{L^* U^*}} = \sqrt{\frac{\mu^* Le}{\rho^* L^* U^* Pr}} = \sqrt{\frac{Le}{Re Pr}} \quad (7.3)$$

Où l'on a introduit le nombre de Reynolds $Re = \rho^* U^* L^* / \mu^*$

Pour déterminer l'ordre de grandeur du temps associé à la production chimique, considérons une réaction chimique de dissociation dans le sens direct :



Le taux de production de A_2 est donné par (cf. relation (5.10)) :

$$\omega_{A_2}^* = -\frac{1}{M_M^*} A_c^* T^{*B_c} \exp(-\theta_c^*/T^*) (\rho_{A_2}^* \rho_M^*)$$

$$= -\frac{C_{A_2} C_M}{M_M^*} \rho^{*2} A_c^* T^{*B_c} \exp(-\theta_c^*/T^*) \quad (7.4)$$

Le temps caractéristique de la chimie peut donc être estimé à partir de :

$$\frac{1}{t_p^*} = \frac{-\omega_{A_2}^*}{\rho_{A_2}^*} = \frac{C_M}{M_M^*} \rho^* A_c^* T^{*B_c} \exp(-\theta_c^*/T^*) \quad (7.5)$$

On voit ainsi que le temps caractéristique de la chimie est inversement proportionnel à la masse volumique et à la réaction. De plus, la présence du terme exponentiel dans (7.5) entraîne des variations très rapides de t_p^* en fonction de la température. A titre de comparaison, lors d'une rentrée atmosphérique, à 75 km d'altitude, la température derrière l'onde de choc avoisine les 14 000 °K et vaut 6000 °K environ près du point d'arrêt. Pour la dissociation de l'oxygène $\theta_c^* = 59500^\circ K$ et environ et $B_c = -1$, le terme dépendant de la température varie alors pour ces deux valeurs extrêmes d'un facteur 120 environ. En tenant compte de la variation de la masse volumique, on trouve que le temps caractéristique de la chimie varie d'un rapport de dix dans la région du point d'arrêt. Ce rapport dépend bien entendu de la réaction considérée ($\theta_c^* = 113200^\circ K$ pour une dissociation de l'Azote et 75 000 °K pour celle du monoxyde d'Azote).

Par ailleurs, à 48 km d'altitude, la température derrière l'onde de choc n'atteint plus que 4000 °K environ contre 3000 °K près du point de stagnation. En revanche, la masse volumique à l'infini vaut alors $1.3 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ au lieu de $3.2 \cdot 10^{-5} \text{ kg/m}^3$ à 75 km. Un rapide calcul montre que le temps caractéristique derrière l'onde de choc est 300 fois plus rapide à 48 km qu'au début de la rentrée.

Le rapport t_∞^*/t_p^* donne une indication du degré de déséquilibre de l'écoulement. Si les phénomènes chimiques sont nettement plus rapides que ceux liés à la convection, l'écoulement est à l'équilibre chimique. L'équation (7.2) est alors remplacée par :

$$\omega_i^* = 0 \quad (7.6)$$

En revanche, si les processus chimiques sont très lents devant le temps caractéristique de convection, l'écoulement est figé. Il est alors gouverné par l'équation suivante :

$$\frac{\partial \rho_i^*}{\partial t^*} + \frac{\partial(\rho_i^* u^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\rho_i^* v^*)}{\partial y^*} = \frac{\partial}{\partial y^*} \left(\rho^* D_{12}^* \frac{\partial C_i}{\partial y^*} \right) \quad (7.7)$$

Dans le cas d'une paroi non catalytique où $(\partial C_i / \partial y^*)_{y^*=0} = 0$, une solution simple est obtenue en prenant un champ de fractions massiques constant au sein de l'écoulement [36].

Au cours d'une rentrée atmosphérique, une navette passe donc d'un écoulement figé à haute altitude à un écoulement à l'équilibre à basse altitude [10]. Entre ces deux régimes extrêmes, l'écoulement est en déséquilibre chimique et met en jeu de nombreux temps caractéristiques dépendant de l'altitude et des réactions. Enfin, la taille de l'appareil intervient aussi dans le rapport t_∞^*/t_p^* . Lorsque la taille augmente, le temps de convection s'accroît et si les autres grandeurs restent constantes, ce rapport augmente. L'écoulement tend donc vers l'équilibre au bout de l'appareil.

7.2.2. Equations sans dimension

D'un point de vue numérique, pour éviter une trop grande disparité d'échelles de grandeur entre les différentes variables, il est opportun de travailler sur un système d'équations rendues sans dimension.

Nous introduisons donc une échelle de longueur L_{ref}^* caractéristique de la géométrie (pour les corps émoussés, on prend par exemple le rayon du nez), une température de référence T_{ref}^* (qui peut être égale à la température à l'infini amont ou à la température d'arrêt par exemple) et une viscosité de référence μ_{ref}^* (qui n'est pas forcément $\mu^*(T_{ref}^*)$). Les autres grandeurs utilisées pour rendre les équations sans dimension sont la vitesse et la masse volumique à l'infini amont u_∞^* et ρ_∞^* . On définit alors les quantités sans dimension suivantes :

$$\begin{aligned} x &= x^* / L_{ref}^*, & y &= y^* / L_{ref}^*, & t &= t^* (u_\infty^* / L_{ref}^*), & \rho_1 &= \rho_1^* / \rho_\infty^*, \\ \rho &= \rho^* / \rho_\infty^*, & u &= u^* / u_\infty^*, & v &= v^* / v_\infty^*, & E &= E^* / (\rho_\infty^* u_\infty^{*2}), \\ h_1 &= h^* / (u_\infty^{*2}), & P &= P^* / (\rho_\infty^* u_\infty^{*2}), & T &= T^* / T_{ref}^*, & R_1 &= R_1^* (u_\infty^{*2} / T_{ref}^*), \\ \mu &= \mu^* / \mu_{ref}^*, & \omega_1 &= \omega_1^* (L_{ref}^* / \rho_\infty^* u_\infty^*). \end{aligned}$$

Les équations de Navier – Stokes se transforme alors en :

$$\frac{\partial(y^a U)}{\partial t} + \frac{\partial(y^a F)}{\partial x} + \frac{\partial(y^a G)}{\partial y} + a\mathcal{P} = \frac{\partial(y^a F_v)}{\partial x} + \frac{\partial(y^a G_v)}{\partial y} + aH_v + y^a S \quad (7.8)$$

Où $Re = \rho_\infty^* U_\infty^* L_{ref}^* / \mu_{ref}^*$ est le nombre de Reynolds formé avec les grandeurs de référence. Dans l'équation (7.8), chacun des termes à la même expression formelle que son équivalent avec dimensions, mais en remplaçant chaque variable par son équivalent sans dimension.

L'équation d'état conserve la même forme à condition, pour le premier modèle utilisé, de rendre les énergies de formation et les températures de vibration sans dimension. Dans le deuxième modèle, les coefficients polynomiaux doivent aussi être modifiés. Le détail technique de la procédure est donné en annexe C.1.1.

Pour les termes de diffusion, les mêmes relations formelles restent valables, seules les valeurs des constantes qui y figurent se trouvent changées : voir annexe C.1.2.

L'expression des taux de production se trouve également transformée, comme indiqué en annexe C.1.3.

7.3 Equations en coordonnées curvilignes

Pour traiter des écoulements autour de formes arbitraires, il est plus approprié d'introduire un système de coordonnées curvilignes (ξ, η) défini par :

$$\xi = \xi(x, y) \quad ; \quad \eta = \eta(x, y)$$

le jacobien J de la transformation s'écrit :

$$J = \frac{\partial(\xi, \eta)}{\partial(x, y)} = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x = \frac{1}{x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta} \quad (7.9)$$

On a alors les relations suivantes entre les différentes dérivées :

$$\begin{aligned} \xi_x &= J y_\eta & \eta_x &= -J y_\xi \\ \xi_y &= -J x_\eta & \eta_y &= -J x_\xi \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \xi_x \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial}{\partial \eta} \quad \frac{\partial}{\partial y} = \xi_y \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial}{\partial \eta}$$

Les équations (7.8) peuvent alors s'écrire sous la forme conservative ou semi conservative suivante [143] :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial(y^a U)}{\partial t} + \frac{\partial(y^a \hat{F})}{\partial \xi} + \frac{\partial(y^a \hat{G})}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \mathcal{P} &= \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial(y^a \hat{F}_v)}{\partial \xi} + \frac{\partial(y^a \hat{G}_v)}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \hat{H}_v \\ &+ \frac{y^a}{J} S \end{aligned} \quad (7.11)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \hat{F} &= \frac{1}{J} (\xi_x F + \xi_y G) & \hat{G} &= \frac{1}{J} (\eta_x F + \eta_y G) \\ \hat{F}_v &= \frac{1}{J} (\xi_x F_v + \xi_y G_v) & \hat{G}_v &= \frac{1}{J} (\eta_x F_v + \eta_y G_v) \end{aligned}$$

Et où l'écriture complète de F_v , G_v et \hat{H}_v est donnée en annexe C.2

7.4. Hypothèse de couche mince

7.4.1 Introduction

Lorsque le nombre de Reynolds est assez élevé, l'étude d'écoulements visqueux en présence d'une paroi nécessite une bonne représentation des termes visqueux dans une mince couche près de la paroi où les gradients normaux sont importants. De plus, les écoulements considérés ici présentent une direction privilégiée, la direction longitudinale, selon laquelle les gradients visqueux sont plus faibles. Typiquement, les maillages utilisés pour une simulation numérique sont raffinés dans une direction normale à la paroi pour assurer une bonne représentation des gradients normaux. Par contre, pour limiter le stockage et le temps de calcul, le raffinement est moindre dans la direction longitudinale ce qui conduit à une moins bonne représentation des gradients dans cette direction. En conséquence, nous faisons maintenant l'hypothèse de couche de cisaillement mince, c'est-à-dire que nous négligeons dans les termes visqueux (et dans les termes visqueux seulement), les gradients selon la direction longitudinale. Le système d'équations obtenu, appelé équations de Navier Stokes dans l'approximation de couche mince, reste de nature hyperbolique – parabolique en temps. De même que pour les équations de Navier Stokes complète, la recherche de la solution stationnaire d'un problème s'effectue à l'aide d'une méthode pseudo – stationnaire ou marche en temp.

Cette approximation, contrairement aux équations de couche limite, retient toutes les propriétés de l'écoulement non visqueux. En outre, contrairement à l'approximation dite de Navier Stokes parabolisé et qui correspond à l'approximation de couche mince pour un écoulement supersonique), elle permet de traiter des écoulements mixtes subsonique – supersonique ou des zones à décollements.

Toutefois, l'approximation de couche mince impose que les maillages utilisés soient de type ...couche limite, c'est-à-dire que la paroi corresponde à une ligne $\eta = \text{constante}$, [54], [102], Dans toute la suite de ce travail, on définit donc la direction longitudinale ξ (indice i) selon la paroi et la direction transversale η (indice j) de telle sorte que l'indice $j=1$ corresponde à la paroi.

7.4.2. Jeu final d'équations

En négligeant donc dans les termes visqueux les dérivées selon ξ devant celles selon η , on obtient le jeu suivant d'équations :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial(y^a U)}{\partial t} + \frac{\partial(y^a \hat{F})}{\partial \xi} + \frac{\partial(y^a \hat{G})}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \mathcal{P} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial(y^a S_{v_1})}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \frac{1}{\text{Re}} S_{v_3} + \frac{y^a}{J} S \quad (7.12)$$

Où les vecteurs \hat{F}, \hat{G} et \hat{H}_v restent les mêmes que dans la section 7.3 et où les vecteurs S_{v_1} et S_{v_3} sont détaillés dans l'annexes D.3. Le système d'équations (7.12) constitue le jeu final d'équations à discrétiser.

Part II

FORMULATION NUMERIQUE

Chapitre 8

8. Introduction

Pour introduire la méthode de discrétisation choisie, prenons par exemple un système d'équations de la forme suivante, qui modélise les équations de Navier – Stokes de couche mince avec termes sources :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = \frac{\partial G_v(U)}{\partial y} + S_0(U) \quad (8.1)$$

Où x et y sont deux directions d'espace, t la variable temporelle, $U, F, G; G_v, S_0$ des vecteurs de \mathbf{R}^P .

Il existe principalement quatre types d'approche pour résoudre numériquement le système (8.1) : les méthodes aux différences finies, volumes finis, éléments finis et les méthodes spectrales. Seule la méthode des volumes finis, choisie ici, sera décrite.

8.1. Méthode des volumes finis

On intégrant le système d'équations (8.1) sur une surface dite \mathcal{S} on trouve :

$$\iint_{\mathcal{S}} \frac{\partial U}{\partial t} + \iint_{\mathcal{S}} \left(\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} \right) d\mathcal{S} = \iint_{\mathcal{S}} \frac{\partial G_v}{\partial y} d\mathcal{S} + \iint_{\mathcal{S}} S_0 d\mathcal{S} \quad (8.2)$$

Appliquons maintenant le théorème de Green : sur une surface \mathcal{S} de contour $\delta\mathcal{S}$, on peut écrire pour un vecteur \vec{V} de coordonnées V_1 et V_2 , avec \vec{n} normale à $\delta\mathcal{S}$:

$$\iint_{\mathcal{S}} \left(\frac{\partial V_1}{\partial x} + \frac{\partial V_2}{\partial y} \right) dx dy = \oint_{\delta\mathcal{S}} \vec{V} \cdot \vec{n} dl = \oint_{\delta\mathcal{S}} (V_1 dy - V_2 dx). \quad (8.3)$$

Où la dernière égalité n'est vérifiée que pour un système de coordonnées orthogonales. On obtient ainsi pour l'équation (8.2) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{\mathcal{S}} U d\mathcal{S} + \oint_{\delta\mathcal{S}} (F dy - G dx) = \oint_{\delta\mathcal{S}} -G_v dx + \iint_{\mathcal{S}} S_0 d\mathcal{S}. \quad (8.4)$$

Supposons maintenant que la surface \mathcal{S} représente un volume de contrôle élémentaire au sein du domaine de calcul. C'est-à-dire typiquement pour un maillage cartésien, un quadrilatère centré au point M de coordonnées (x,y) . Les points de maillage sont donnés par $x_i = (i-1)\Delta x$ et $y_j = (j-1)\Delta y$ où i et j sont des entiers et Δx et Δy les pas d'espace dans chaque direction, supposés ici constants pour simplifier l'exposé. Les frontières de chaque volume de contrôle sont données par exemple par $\left(x = x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}} \leq y \leq y_{j+\frac{1}{2}} \right)$

où $\left(x_{i-\frac{1}{2}} \leq x \leq x_{i+\frac{1}{2}}, y = y_{j+\frac{1}{2}} \right)$, (Voir figure 8.1).

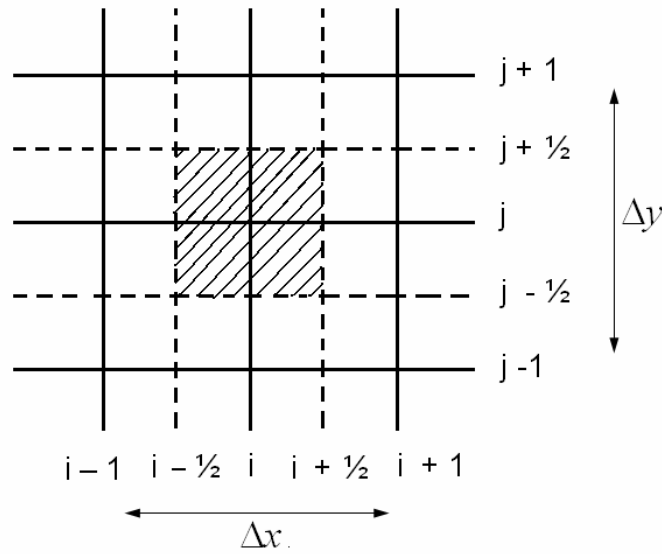


Figure 8.1: maillage volumes finis

Introduisons les valeurs moyennes sur la surface \mathcal{S} :

$$U_{ij} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \iint_{\mathcal{S}} U dx dy, \quad S_{0ij} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \iint_{\mathcal{S}} S_0 dx dy$$

Et notons sur la frontière $\left(x = x_{i+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}} \leq y \leq y_{j+\frac{1}{2}} \right)$:

$$F_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{\Delta y} \int_{\delta_y} F dy . \quad (8.5)$$

On définit de même $F_{i-\frac{1}{2},j}$ sur la frontière $\left(x = x_{i-\frac{1}{2}} \right)$ et $G_{i,j-\frac{1}{2}}, G_{vi,j-\frac{1}{2}}$ (resp : $G_{i,j+\frac{1}{2}}, G_{vi,j+\frac{1}{2}}$ sur les frontières $\left(y = y_{i-\frac{1}{2}} \right)$, (resp : $\left(y = y_{i+\frac{1}{2}} \right)$), .En appliquant les relations (8.3) à l'équation (8.4) on obtient :

$$\frac{\partial U_{i,j}}{\partial t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2},j} - F_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{G_{i,j+\frac{1}{2}} - G_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} = \frac{G_{vi,j+\frac{1}{2}} - G_{vi,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} + S_{0i,j} . \quad (8.6)$$

Une propriété importante des méthodes volumes finis apparaît clairement dans la formulation (8.6) : pour les systèmes conservatifs (G_v et S_o), les méthodes des volumes finis garantissent automatiquement la conservation locale (c'est-à-dire sur chaque volume de contrôle). Par ailleurs pour des écoulements présentant des ondes de chocs, les méthodes de discrétisation conservative assurent la détermination correcte des ondes de chocs conformément au théorème de LAX qui démontre que si le schéma converge, il converge vers une solution faible du problème : il permettra donc en particulier de capturer les ondes de chocs, si de plus on peut s'assurer que la solution limite vérifie la condition entropique, le schéma convergera vers l'unique solution entropique. La méthode des volumes finis est aussi particulièrement adaptée lorsqu'on s'intéresse aux équations instationnaire .En effet , la variation temporelle de la grandeur U au centre du volume de contrôle ne fait intervenir que la détermination des flux aux frontières de ce même volume de contrôle.

8.2. Détermination des flux aux interfaces

Le choix de la méthode numérique va maintenant consister à définir les différents flux interfaciques apparaissant dans l'équation (8.6), en termes des grandeurs $U_{i,j}$. D'un point de vue numérique, les termes de convection – pression sont les plus délicats à traiter puisque ce sont les termes dominants dans la région où se trouvent des ondes de chocs .Leur traitement peut poser des problèmes de stabilité au voisinage des ondes de chocs que l'on résout généralement par l'apport de diffusion numérique. De ce point de vue, les termes de diffusion physique, associés par nature à des phénomènes de dissipation, ont été évidemment plus faciles a discrétiser .Néanmoins, on essaiera de s'assurer que la dissipation numérique qu'on introduira pour stabiliser le schéma numérique, ne nuira pas à la qualité de la solution. En particulier dans les zones visqueuses, elle doit rester faible par rapport à la dissipation physique.

On peut également remarquer sur la forme discrétisée (8.6) que la détermination des différents flux aux interfaces peut être , a priori , faite de manière indépendante , cette approche que nous avons adoptée , nous a permit d'avoir une grande souplesse dans le traitement numérique séparé des différents termes (convectifs , visqueux , sources) .

Termes de convection – pression

En ce qui concerne le traitement des termes de convection – pression le problème bidimensionnel (1) est décomposé en deux problèmes mono dimensionnels de la forme :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial X} = 0 \quad \text{soit} \quad \frac{\partial U}{\partial t} + A(U) \frac{\partial U}{\partial X} = 0. \quad (8.7)$$

où F représente l'un des deux flux F ou G et X la direction d'espace correspondante. Dans le cas traité ici des équations d'Euler mono dimensionnelles, la présence du terme instationnaire rend les équations de nature hyperbolique. La matrice Jacobienne $A(U) = \partial F(U)/\partial U$ admet donc un jeu complet de valeurs propres qui peuvent être éventuellement multiples, dont les vecteurs propres associés forment une base de \mathbb{R}^p .

Le schémas de discrétisation que nous utilisons dans cette étude pour la détermination des flux numériques F et G aux interfaces (cf. formule 8.5) s'appuie sur une linéarisation locale de l'équation (8.7). elle est obtenue en évaluant la matrice \bar{A} à l'état local \bar{U} . En se plaçant alors dans un système local de directions caractéristique associé, donc le système (8.7) est transformé en un système d'équations scalaires hyperboliques découplées (voir chapitre 11). Ainsi, le schéma de discrétisation utilisé est-il obtenu à partir d'un schéma numérique développé pour la discrétisation d'équations scalaires hyperboliques. Où dans le cas général la matrice \bar{A} n'est plus constante elle sera approximée par la matrice $\bar{A}_{i+1/2}$ et qu'à chaque interface $i+1/2$, on a considéré le système localement linéarisé.

Dans le chapitre 9, nous rappellerons donc quelques propriétés de base sur les solutions d'une équation non linéaire scalaire hyperbolique. Nous verrons ensuite que la non linéarité de l'équation empêche en fait le développement d'une solution régulière sur un temps donné (fini ou infini). Nous introduirons alors la notion de solution faible.

Dans le chapitre 10, nous abordons la discrétisation explicite en temps d'une équation scalaire hyperbolique (problème de Cauchy) et après quelques rappels sur les schémas numériques existants (lax- Friedrichs, Lax – Wendroff, décentré upwind, Murman-Roe, Godunov ...) nous insisterons sur la propriété TVD (Total Variation Diminishing) cette classe de schémas a été retenue dans ce travail car ils sont bien adaptés au calcul d'écoulements hypersoniques où existent des ondes de chocs fortes. Ils permettent en effet de capturer les ondes de chocs sans introduire d'oscillation parasites tout en assurant une bonne précision de la solution [157]. nous présenterons tout d'abord les schémas TVD précis au premier ordre en espace puis nous en donnerons l'extension au deuxième. Une forme implicite en temps sera également présentée. Nous ferons enfin quelques remarques sur l'influence de l'introduction d'un terme source dans l'équation scalaire.

Le chapitre 11 sera consacré à l'extension formelle du schéma scalaire pour la discrétisation d'un système monodimensionnel du type (8.7). Comme nous l'avons indiqué plus haut, cette extension s'appuie sur une linéarisation locale de (8.7), où la matrice jacobéenne A est évaluée à un état moyen local \bar{U} (défini pour chaque interface); on utilisera pour la détermination de cet état moyen, la formulation proposée par Roe [103]. Le système linéarisé est ensuite écrit suivant le système local de directions caractéristiques pour se ramener à un système d'équations scalaires découplées.

Enfin la formulation complète de la discrétisation des équations d'Euler bidimensionnelles sera indiquée dans le chapitre 12. Nous étudierons d'abord les équations écrites dans un système de coordonnées cartésiennes avant d'introduire un système de coordonnées curvilignes. L'extension du solveur de Roe sera aussi présentée pour les équations d'Euler pour un mélange de gaz

Termes visqueux et termes sources

La discrétisation des termes visqueux et des termes sources sera abordée dans le chapitre 13. Nous y donnerons également la forme complète de la discrétisation des équations de Navier Stokes de couche mince pour un mélange réactif.

Discrétisation temporelle.

La plus part des applications envisagées étant stationnaire, une méthode dite pseudo – instationnaire est utilisée ici : à partir d'une solution initiale quelconque, on avancera en temps jusqu'à l'obtention d'une solution stationnaire convergée. Du point de vue de la stabilité numérique, les termes visqueux et les termes sources introduisent une difficulté supplémentaire par rapport aux équations d'Euler. Comme nous l'avons vu précédemment, les temps caractéristiques de la convection, de la diffusion et de la chimie peuvent être très différents. Si on choisit un schéma explicite en temps, les critères de stabilité limitent le pas d'avancement au minimum des différents temps caractéristiques présents dans le problème. Il peut en résulter une restriction très pénalisante sur le pas d'avancement de la solution (en particulier dans le cas de la recherche de la solution stationnaire) dont on peut s'affranchir en utilisant une méthode entièrement implicite ; la procédure est détaillée dans le chapitre 13.

Chapitre 9

9. Rappels sur les lois de Conservation hyperbolique

Nous avons jugé utile de consacrer ce chapitre au rappel de quelques propriétés de base des lois de conservation hyperbolique qui seront utilisées par la suite pour la construction de schémas de discrétisation appropriés. Ces résultats ont été obtenus pour la première fois à la fin des années 50 par Oleinik [94] et Lax [79]. Le développement que nous allons exposer ici s'appuie principalement sur les travaux théoriques et classiques de Godlewski et Raviart [51] et de J. Smoller [124].

Considérons la loi de conservation scalaire :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0 \\ v(x,0) = v_0(x) \end{cases} \quad (9.1)$$

Où x est la variable d'espace ($x \in \mathcal{H}$), $t > 0$ la variable temporelle, v une fonction de $\mathcal{H} \times]0, \infty[$ à valeurs dans un ouvert Ω de \mathcal{H} et où f est une fonction régulière de Ω à valeurs réelles. On associe à (9.1) la solution initiale $v(x, 0)$ où v_0 est une fonction donnée de \mathcal{H} dans Ω .

9.1. Solutions faibles

Théorie des caractéristiques

Pour rechercher la solution classique de (9.1), appliquons la théorie des caractéristiques. Une courbe caractéristique associée à (9.1) est le lieu des points vérifiant l'équation différentielle :

$$\frac{\partial x}{\partial t} = a[v(x,t)] \quad (9.2)$$

Où $a(v) = \partial f / \partial v$.

La fonction v est constante sur une courbe caractéristique. En effet, le long des caractéristique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} v[x(t), t] &= \frac{\partial v}{\partial t}[x(t), t] + \frac{\partial v}{\partial x}[x(t), t] \frac{\partial x(t)}{\partial t} \\ &= \left(\frac{\partial v}{\partial t} + a(v) \frac{\partial v}{\partial x} \right) [x(t), t] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (9.3)$$

La pente des caractéristiques donnée par (9.2) , est constante et déterminée par la condition initiale v_0 : les caractéristiques forment ainsi un réseau de droites . La droite caractéristique passant par le point $(x_0, 0)$ a pour équation :

$$x = x_0 + a[v_0(x_0)]t. \quad (9.4)$$

Supposons maintenant qu'il existe deux points x_1 et x_2 avec $x_1 < x_2$ tels que les pentes des caractéristiques C_1 passant par x_1 et C_2 passant par x_2 vérifient (voir figure 9.1) :

$$1/a[v_0(x_1)] < 1/a[v_0(x_2)] \quad (9.5)$$

Les caractéristiques C_1 et C_2 se croisent nécessairement en un point M au bout d'un temps fini. On obtient ainsi en ce point et à ces instantes deux valeurs distinctes pour la fonction $v : v_0(x_1)$ et $v_0(x_2)$, ce qui est impossible puisque les solutions classiques sont par nature supposées régulières. Ainsi , pour prendre en compte d'éventuelles discontinuités de la solution , on est amené à agrandir la classe de solutions pour le problème posé de (9.1) en introduisant la notion de solution faible (ou solution au sens des distributions).

Solution faible et relations de Rankine – Hugoniot

Considérons une fonction test φ continûment dérivable, à support compact dans $\mathcal{R} \times [0, \infty]$. En multipliant (9.1) par φ et en intégrant par parties sur $t \geq 0$ on obtient :

$$\int_0^{+\infty} \int_{\mathcal{R}} \left(v \frac{\partial \varphi}{\partial t} + f(v) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dt + \int_{\mathcal{R}} v_0 \varphi(x, 0) dx = 0. \quad (9.6)$$

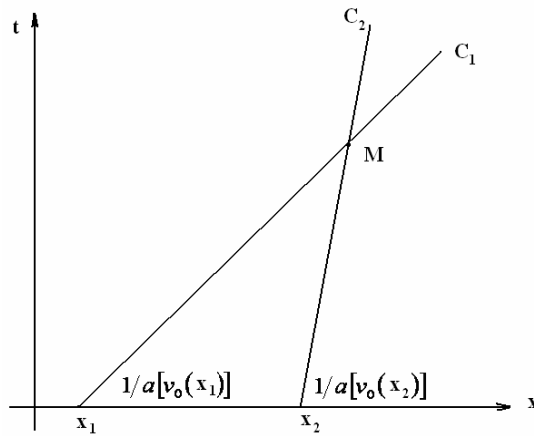


Figure 9.1: Intersection de caractéristiques.

On appellera solution faible (ensuite par extension solution tout court) du problème (9.1) une fonction v mesurable, bornée qui vérifie la solution (9.6). Si v est continûment dérivable, on montre qu'alors v est aussi une solution classique de (9.1)

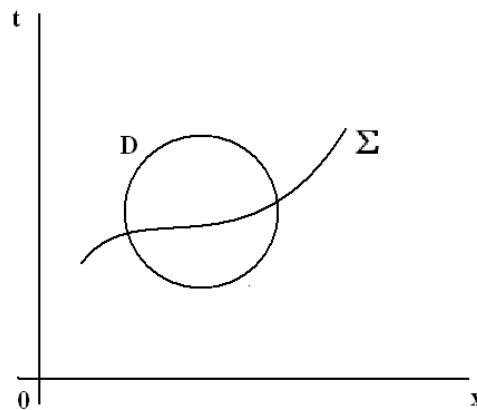


Figure 9.2 : Domaine admettant une discontinuité

Cependant la relation (9.6) n'autorise pas n'importe quel type de discontinuité : en considérant un domaine D dans lequel la fonction v admet une discontinuité à travers une courbe Σ (voir figure (9.2)), et en appliquant le théorème de Green sur ce domaine à l'équation 9.6 on trouve les relations de saut suivantes :

$$s(v_+ - v_-) = (f_+ - f_-) \quad (9.7)$$

En chaque point de Σ avec $s = dx/dt$ vitesse de la discontinuité. Les indices \pm caractérisent les grandeurs de part et d'autre de la discontinuité. Ces relations sont connues sous le nom de relations de Rankine - Hugoniot.

Ainsi la notion de solution faible permet – elle de prendre en compte des solutions présentant des discontinuité , à condition que les relations citées précédemment à travers ces discontinuités soient vérifiées . Néanmoins, en élargissant de cette manière la classe de solutions, on ne peut plus assurer qu’il y’ait unicité de la solution ; comme le montre l’exemple que nous allons exposer dans ce qui suit.

Non – unicité de la solution : Exemple

Soit l’équation dite de Burgers sans viscosité :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial v^2}{\partial x} = 0 \\ v_0(x_0) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \end{cases} \quad (9.8)$$

Les droites caractéristiques sont définies par (9.5) : $x = v_0(x_0)t + x_0$. Pour x négatif , ce sont des droites verticales , pour x positif , ce sont des droites de pente unité (voir figure 9.3) La solution pour $t > 0$ est donc définie partout par la méthode des caractéristiques, excepté dans le domaine $0 < x < t$. Les fonctions $v_1(x,t)$ et $v_2(x,t)$ suivantes :

$$v_1(x,t) = \begin{cases} 0 & x < t/2 \\ 1 & x > t/2 \end{cases} , \quad v_2(x,t) = \begin{cases} 0 & x < t/2 \\ x/t & 0 < x < t \\ 1 & x > t/2 \end{cases} \quad (9.9)$$

Diffèrent justement dans ce domaine et sont nécessaire d’introduire un principe supplémentaire, qui permettra de sélectionner, parmi l’ensemble des solutions faibles, la solution physique du problème. Ce principe fait appel à la notion d’entropie qui est présentée dans la section suivante :

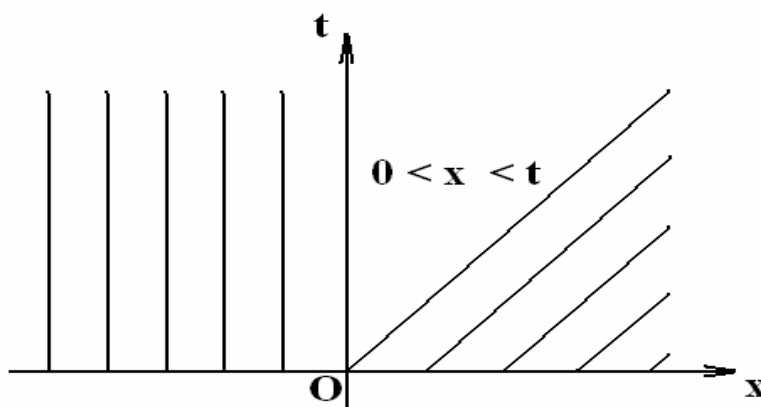


Figure 9.3: Droites caractéristiques pour l’équation de Burgers.

9.2. Notion d'Entropie

9.2.1. Condition entropique

Il existe de multiples façons de présenter la condition supplémentaire (dite condition d'entropie) qui permet de sélectionner la solution physique du problème (9.1). Nous choisissons ici de présenter cette condition de manière très simpliste.

Supposons que la solution présente une discontinuité se propageant à la vitesse s . Pour que le problème soit bien posé, en ce sens que la zone notée + (resp. -), définie pour $x - st > 0$ (resp. $x - st < 0$), on puisse déterminer la solution à partir soit des conditions initiales, soit des conditions aux limites, il est nécessaire que la solution vérifie (voir figure 9.4) :

$$f'(v_-) > s > f'(v_+) \quad (9.10)$$

Bien entendu, la vitesse s de la discontinuité et les valeurs v_{\pm} de v de part et d'autre de la discontinuité, doivent également vérifier la relation de Rankine – Hugoniot (9.7) :

$$s(v_+ - v_-) = (f_+ - f_-)$$

La relation (9.10) est appelée inégalité entropique. Elle établit que la vitesse d'une onde de choc est comprise entre les vitesses caractéristiques de part et d'autre de la discontinuité.

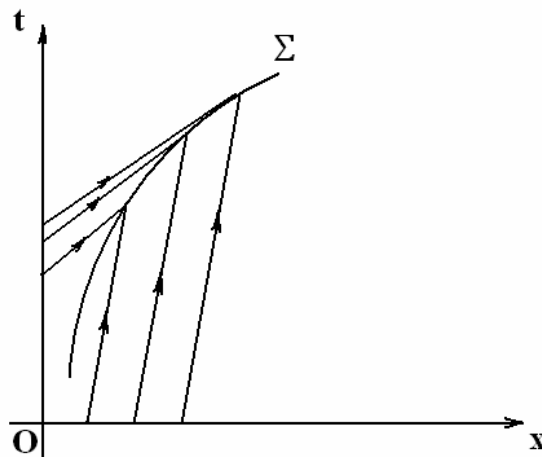


Figure 9.4 : Discontinuité admissibles

Quant on revient maintenant à l'exemple de la section précédente. On constate que, pour la solution v_1 , l'inégalité entropique n'est plus vérifiée à travers la discontinuité puisque :

$$f'(v_{1-}) = 0 < s = 1/2 < f'(v_{1+}) = 1 \quad (9.11)$$

Et la solution v_1 est donc à rejeter.

Dans les sections suivantes, nous allons voir qu'en fait l'inégalité entropique (9.10) permet effectivement de sélectionner de façon unique la solution physique du problème (9.1).

9.2.2. Méthode de viscosité

Considérons les deux équations non linéaires, respectivement hyperboliques et paraboliques :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0, \quad (9.12)$$

et

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = \beta \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad \beta > 0 \quad (9.13)$$

D'un point de vue physique, le problème à traiter est toujours légèrement dissipatif. Il est donc raisonnablement modélisé par une équation du type (9.13), la modélisation associée à (9.12) représentant alors le cas limite où la viscosité β tend vers zéro. D'un point de vue purement mathématique, il existe des résultats d'existence et d'unicité de solutions régulières pour les équations paraboliques du type (9.13) [51]. Il est donc naturel de définir comme solution de (9.12), la limite (si elle existe) des solutions v_β de (9.13) lorsque β tend vers zéro. On peut montrer [124] et [51] que ce passage à la limite peut effectivement être effectué et qu'il définit de façon unique la solution entropique de (9.12). Cette dernière vérifie alors la condition entropique :

$$f'(v_-) > s > f'(v_+) \quad (9.14)$$

Remarques :

- On retrouve bien la condition (9.10) obtenue précédemment de façon plus géométrique.
- Les processus physiques décrits par des solutions régulières d'équations hyperboliques sont en général réversibles (en temps), contrairement à ceux décrits par des solutions discontinues. Par exemple, l'entropie physique augmente à travers l'onde de choc et par conséquent l'information (réciproque de l'entropie) est perdue. Le problème parabolique introduit la notion d'irréversibilité puisque la transformation de t en $-t$ ne laisse pas le problème invariant, ce qui peut expliquer que cette méthode permette de sélectionner la solution physique parmi l'ensemble des solutions du problème.
- Il existe une autre manière de présenter la notion de solution entropique en introduisant a priori une fonction convexe \aleph dite fonction entropie et une fonction \aleph dite flux d'entropie telles que

$$\frac{\partial \aleph(v)}{\partial v} \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{\partial \aleph}{\partial v} \quad (9.15)$$

Une solution de (9.12) est alors dite solution entropique si elle satisfait la condition suivante :

$$\frac{\partial \mathfrak{N}}{\partial v}(v) + \frac{\partial \mathfrak{T}}{\partial x}(v) \leq 0. \quad (9.16)$$

A travers une discontinuité, le flux entropique \mathfrak{T} vérifie une relation équivalente à (9.7) :

$$\mathfrak{T}(v_+) - \mathfrak{T}(v_-) - s[\mathfrak{N}(v_+) - \mathfrak{N}(v_-)] \leq 0. \quad (9.17)$$

On montre que les inégalités (9.14) et 9.16) sont rigoureusement équivalentes. Cette deuxième approche a le mérite de permettre de justifier la terminologie utilisée. En effet, en dynamique des gaz $\mathfrak{N} = -\rho s$ (où s est l'entropie thermodynamique spécifique) est une entropie au sens ci-dessus.

9.2.3. Théorème d'existence et d'unicité

On a le résultat d'existence et d'unicité de la solution entropique, dû à Oleinik [94] puis Kruskov [71] :

Théorème 9.1 :

si $v_0 \in L^\infty(\mathfrak{R})$ alors (9.1) a une unique solution entropique, si de plus $v_0 \in L^\infty(\mathfrak{R}) \cap BV(\mathfrak{R})$ alors la solution entropique $v(x,t)$ est telle que :

$$TV(v(x,t)) \leq TV(v_0)$$

Où $BV(\mathfrak{R})$ est l'espace des fonctions localement intégrables à variation totale bornée.

C'est-à-dire :

$$BV(\mathfrak{R}) = \left\{ g \in L^1_{loc}(\mathfrak{R}), TV(g) < \infty \right\}$$

et

$$TV(g) = \sup_{\substack{\phi \in C^1_0(\mathfrak{R}) \\ \|\phi\|_\infty = 1}} \int_{\mathfrak{R}} g \frac{d\phi}{dx} dx$$

$C^1_0(\mathfrak{R})$ est l'espace des fonctions réelles C^1 à support compact. Si $g \in L^1_{loc}(\mathfrak{R})$ avec $dg/dx \in L^1_{loc}(\mathfrak{R})$, alors :

$$TV(g) = \int_{\mathfrak{R}} \left| \frac{dg}{dx} \right| dx.$$

Cette propriété de variation totale décroissante a motivé le développement des schémas connus sous le nom *TVD*.

Chapitre 10

10. Schémas TVD pour une équation de conservation scalaire hyperbolique

Ce chapitre est consacré à la discrétisation du problème de Cauchy pour une équation de conservation scalaire hyperbolique :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0 \\ v(x,0) = v_0(x). \end{cases} \quad x \in \mathfrak{R} \quad , \quad t > 0 \quad (10.1)$$

Nous rappellerons tout d'abord quelques notions de base sur les schémas numériques, ainsi que des exemples classiques de schémas pour la discrétisation de l'équation (10.1).

Nous présenterons ensuite le concept de schémas monotones et TVD pour des schémas précis au premier ordre en espace. La section suivante sera consacrée à l'extension des schémas TVD du premier ordre en espace aux schémas TVD du second ordre en espace (dans les régions où la solution est régulière).

Puis, nous donnerons une formulation implicite pour les schémas introduits précédemment. Enfin, dans une dernière section, nous envisagerons l'étude d'une équation scalaire avec termes sources.

Ce chapitre est basé pour une large part sur plusieurs références dont Godlewski et Raviart [51] , Harten et Al [56] , [61] , Osher & Sweby [96] Sjögren [115] et H.Yee [157] et [164].

10.1 Concepts de base sur les schémas Numériques

10.1.1. Définitions

Introduisons tout d'abord une discrétisation en temps : $t^n = n\Delta t$ de pas Δt , et une discrétisation en espace : $x_i = (i - 1) \Delta x$ de pas Δx . Notons λ le rapport des pas de temps et d'espace : $\lambda = \Delta t/\Delta x$ et $i + \frac{1}{2}$ l'interface entre les nœuds i et $i+1$ (Fig. 10.1).

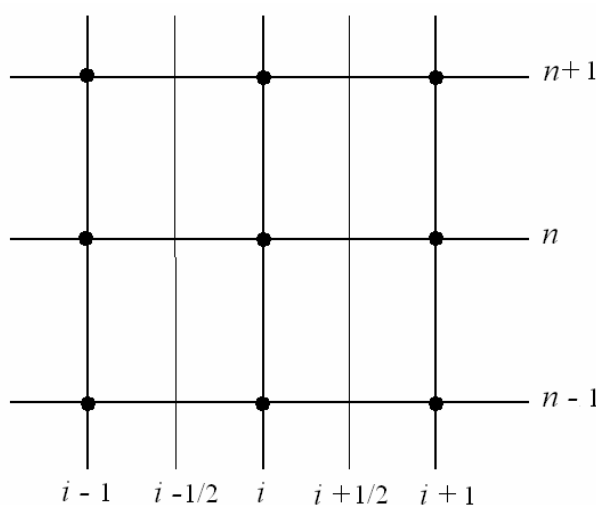


Figure 10.1: Discretisation en espace et temps

L'approximation de l'équation (10.1) est obtenue en considérant le schéma explicite à $(2k + 1)$ points tel que :

$$u_i^{n+1} = H(u_{i-k}^n, \dots, u_{i+k}^n) \quad (10.2)$$

Où H est une fonction continue de \mathfrak{R}^{2k+1} et où $u_i^n = u(x, t^n)$ représente l'approximation de la solution v de (10.1) au point x_i et au temps t^n . Par la suite, lorsque la notation sera évidente et laborieuse, l'indice n sera omis.

Forme conservative

Une forme discrétisée explicite en temps associée à (10.1) est dite conservative si on peut l'écrire de la façon suivante :

$$u_i^{n+1} - u_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (h_{i+1/2}^n - h_{i-1/2}^n) = 0. \quad (10.3)$$

Où $h_{i+\frac{1}{2}}^n$ est appelé flux numérique. C'est une fonction des $2k$ points voisins de i : $h_{i+\frac{1}{2}}^n = h(u_{i-k}^n, \dots, u_{i+k}^n)$. Par exemple, pour une discrétisation à trois points, $h_{i+\frac{1}{2}}^n = h(u_i^n, u_{i+1}^n)$.

On montre qu'un schéma peut être mis sous forme conservative si est seulement si [51]

$$\sum_{i \in \mathbb{N}} H(u_{i-k}, \dots, u_{i+k}) = \sum_{i \in \mathbb{N}} u_i \quad (10.4)$$

Afin d'illustrer ce qui a été mentionner précédemment, nous allons essayer d'être plus explicite à partir d'un exemple simple,

Exemple

Considérons par exemple le schéma linéaire à trois points (avec $f(u) = au$) :

$$u_i^{n+1} = C_{-1}u_{i-1}^n + C_0u_i^n + C_{+1}u_{i+1}^n \quad (10.5)$$

où C_{-1} , C_0 et C_{+1} sont des constantes. la condition (10.4) donne :

$$C_{-1} + C_0 + C_{+1} = 1 \quad (10.6)$$

Soit pour le flux numérique :

$$h_{i+\frac{1}{2}}^n(u_i, u_{i+1}) = \frac{\Delta x}{\Delta t} (C_{-1}u_i - C_{+1}u_{i+1}) \quad (10.7)$$

Consistance

Le flux numérique $h_{i+\frac{1}{2}}^n$ est dit consistant avec la loi conservative (10.1) si :

$$h(u, \dots, u) = f(u) \quad \forall u \in \mathfrak{R} \quad (10.8)$$

En remarquant que $(u_i^{n+1} - u_i^n)/\Delta t$ est une approximation de $\partial u/\partial t$ au point (x_i, t^n) , la propriété de consistance permet de s'assurer que $(h_{i+\frac{1}{2}}^n - h_{i-\frac{1}{2}}^n)/\Delta x$ est de même une approximation de $\partial f(u)/\partial x$ au même point.

exemple

Reprenons l'exemple (10.5). La condition de consistance conduit à :

$$C_{-1} - C_{+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x} a. \quad (10.9)$$

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

Pour les schémas conservatifs et consistants, Lax [78] a montré à partir d'un théorème la théorie mathématique assez complexe suivante :

Théorème 10.1

Soit un schéma mis sous forme conservative et consistant avec l'équation :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0 \\ v(x,0) = v_0(x). \end{cases} \quad x \in \mathfrak{R} \quad , \quad t > 0 \quad \text{on :}$$

Supposons qu'il existe une suite $\Delta_k x$ tendant vers zéro telle que pour $\Delta_k t = \lambda \Delta_k x$ (λ constant) alors :

$$\begin{aligned} & \|u_{\Delta k}\|_{L^\infty(\mathfrak{R} \times [0, \infty])} \leq \text{Constante} \\ & u_{\Delta k} \text{ Converge dans } L^1_{loc}(\mathfrak{R} \times [0, \infty]) \text{ vers une fonction } v \\ & \text{Alors } v \text{ est une solution faible} \end{aligned}$$

Où $u_{\Delta k}(x, t)$ est une solution obtenue à partir de l'approximation discrète de pas $\Delta_k x$ et de $\Delta_k t$

On est ainsi assuré que le schéma converge, il converge vers une solution faible du problème : il permettra donc en particulier de capturer les ondes de chocs. Ceci explique la terminologie usuelle de ces méthodes dite " méthode de capture de l'onde de choc ",

Si de plus on peut s'assurer que la solution limite vérifie la condition entropique, le schéma convergera vers l'unique solution entropique.

Ordre de précision

Une autre notion importante pour les schémas numériques est l'ordre de précision du schéma. Il est déterminé à partir de l'erreur de troncature qui mesure la différence entre la solution exacte à l'instant t^n et l'approximation utilisée. L'erreur de troncature peut être obtenue par des développements en série de Taylor des fonctions u et h . On définit alors l'ordre de précision d'un schéma par le plus grand nombre $p \geq 1$ tel que pour toute solution régulière v de (10.1) ($\lambda = \Delta t / \Delta x = \text{constante}$) :

$$v(x, t + \Delta t) - H[v(x - k\Delta x, t), \dots, v(x + k\Delta x, t)] = O(\Delta t^{p+1}) \quad \text{quand } \Delta t \rightarrow 0 \quad (10.10)$$

Stabilité

Une autre propriété fondamentale d'un schéma numérique est sa stabilité. La stabilité \mathcal{L}^2 est définie pour un problème linéaire et repose sur une analyse de Von Neumann. Considérons le schéma linéaire suivant :

$$u_i^{n+1} = \sum_{l=-k}^{+k} C_l u_{i+l}^n \quad (10.11)$$

Où les C_l sont des constantes. On peut définir la norme de la suite $u = (u_i)_{i \in \mathcal{Z}}$ par :

$$\|u\|_{L^2} = \left(\Delta x \sum_{i \in \mathcal{Z}} u_i^2 \right)^{1/2} \quad (10.12)$$

Le schéma est stable si : $\|u^n\|_{L^2} \leq \|u^0\|_{L^2}, \forall n \geq 0$. Une détermination simple de la stabilité consiste à étudier l'évolution en temps d'une perturbation $\varphi(x, t)$ de la solution, écrite sous la forme :

$$\varphi(x, t^n) = \varphi^n e^{j\Delta x} \quad (\text{avec } j^2 = -1) \quad (10.13)$$

L'introduction de cette perturbation dans le schéma (10.11) conduit à :

$$\varphi^{n+1} = \left(\sum_{l=-k}^{+k} C_l e^{j\Delta x} \right) \varphi^n \quad (10.14)$$

Le schéma est \mathcal{L}^2 est stable s'il n'amplifie par les perturbations, c'est-à-dire :

$$\left| \sum_{l=-k}^{+k} C_l e^{j\Delta x} \right| \leq 1 \quad (10.15)$$

Exemple

Reprenons l'exemple (10.5) et introduisons $q = C_{-1} + C_{+1} = 1 - C_0$. Le schéma linéaire (10.5) (avec les conditions (10.6) et 10.9) peut se mettre sous la forme :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\lambda a}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{q}{2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad (10.16)$$

On montre que la condition (10.15) s'écrit alors :

$$(\lambda a)^2 \leq q \leq 1 \quad (10.17)$$

Dans le cas particulier du schéma de Lax – Wendroff ($q = \lambda^2 a^2$), la condition de stabilité s'écrit :

$$\text{Max } \lambda |a| \leq 1. \quad (10.18)$$

Cette condition a une interprétation géométrique classique, connue sous le nom de condition CFL (Courant – Friedrichs – Levy) : le domaine de dépendance numérique doit contenir le domaine de dépendance physique. Dans le cas d'un schéma à trois points par exemple, le domaine de dépendance numérique est le cône de pente $\Delta t / \Delta x$, tandis que le domaine de dépendance physique est déterminé par les caractéristiques de pente $1/a$ où $a = \partial f / \partial v$, (voir figure 10.2).

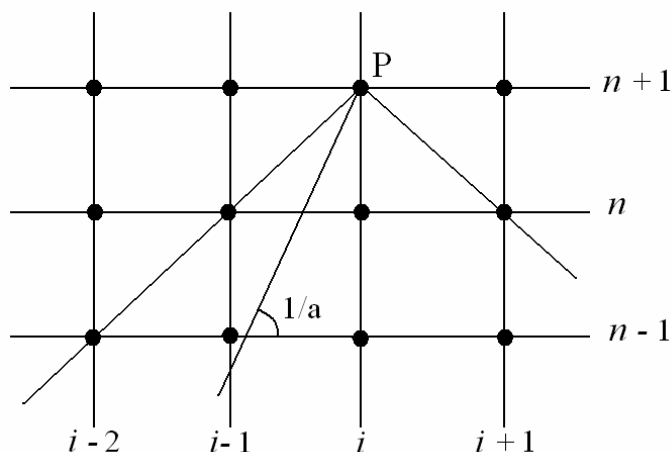


Figure 10.2 : Cônes de dépendance physique et numérique.

Cette condition se traduit mathématiquement par l'inégalité :

$$\frac{1}{a} \geq \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Soit :

$$CFL \leq 1 \tag{10.19}$$

Remarque

Pour une équation non linéaire, il n'existe pas de technique générale pour étudier la stabilité. On s'intéresse souvent à la stabilité locale en linéarisation localement le flux f au point considéré pour se ramener à un problème linéaire.

10.1.2. Exemples de schémas numériques à trois points

Nous présentons ici quelques exemples classiques de schémas numériques à trois points : le schéma de Lax – Friedrichs , celui de Lax – Wendroff que nous avons déjà évoqué puis le schéma décentré upwind ainsi que le schéma de Murman – Roe , enfin nous décrivons brièvement la construction du schéma de Godunov .

Schéma de Lax – Friedrichs

Le schéma de Lax – Friedrichs est donné par :

$$u_i^{n+1} = (u_{i+1} + u_{i-1})/2 - \lambda(f(u_{i+1}) - f(u_{i-1}))/2, \tag{10.20}$$

Soit sous forme conservative :

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left[f(u_i) + f(u_{i+1}) - \frac{1}{\lambda} (u_{i+1} - u_i) \right]. \tag{10.21}$$

Il est précis au premier ordre (au sens de la définition (10.10)) et sa stabilité \mathcal{L}^2 (dans le cas linéaire $f(v) = av$) est donnée par la condition CFL :

$$\lambda|a| \leq 1. \quad (10.22)$$

Enfin, on peut noter que la détermination de u_i^{n+1} par le schéma de Lax – Friedrichs (10.20) ne dépend que de u_{i-1}^n et u_{i+1}^n .

Schéma de Lax – Wendroff

Le schéma de Lax – Wendroff a déjà été introduit pour illustrer la condition CFL (10.18). Il s'écrit :

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\lambda}{2} [f(u_{i+1}) - f(u_{i-1})] + \frac{\lambda^2}{2} \left[a_{i+\frac{1}{2}} (f(u_{i+1}) - f(u_i)) - a_{i-\frac{1}{2}} (f(u_i) - f(u_{i-1})) \right] \quad (10.23)$$

Où $a_{i+\frac{1}{2}}$ est la valeur de df/dv exprimée en un point compris entre u_i et u_{i+1} , par exemple :

$$a_{i+\frac{1}{2}} = a\left(\frac{u_i + u_{i+1}}{2}\right) \quad \text{ou bien} \quad a_{i+\frac{1}{2}} = a(u_i, u_{i+1}) \quad (10.24)$$

Avec

$$a(u_i, v) = \begin{cases} \frac{f(u) - f(v)}{u - v} & u \neq v \\ \frac{df}{dv}(u) & u = v \end{cases} \quad (10.25)$$

Dans le cas d'une équation linéaire, c'est le seul schéma à trois points et à coefficients constants précis au deuxième ordre (au sens de la définition (10.10)).

Schéma décentré upwind pour une équation à coefficients constants

Le schéma décentré upwind est basé sur la méthode des caractéristiques. Considérons donc le cas où le flux f est linéaire et écrivons (10.1) sous la forme :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + a \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (10.26)$$

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

La méthode des caractéristiques indique que la solution est constante sur les courbes caractéristiques de pente $1/a$. On peut donc écrire :

$$u(x, t^{n+1}) = u(x_i - a\Delta t, t^n) = u(x_i - \lambda a\Delta x, t^n) \quad (10.27)$$

Comme l'indique la figure 10.3, où λ a été supposé positif.

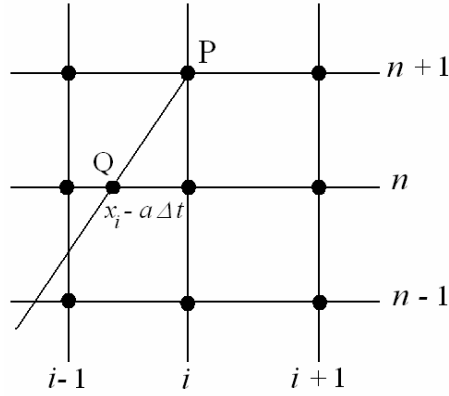


Figure 10.3 : Schéma décentré

On effectue ensuite une interpolation linéaire entre x_{i-1} et x_i , par exemple pour $a > 0$:

$$\begin{aligned} u(x_i, t^{n+1}) &= u(x_i - \lambda a\Delta x, t^n) \\ &\cong (1 - \lambda a)u(x_i, t^n) + \lambda a u(x_{i-1}, t^n) \end{aligned} \quad (10.28)$$

Le schéma décentré upwind s'écrit donc :

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n - \lambda a(u_i^n - u_{i-1}^n) && \text{pour } a > 0 \\ &= u_i^n - \lambda a(u_{i+1}^n - u_i^n) && \text{pour } a < 0 \end{aligned} \quad (10.29)$$

Il est précis au premier ordre et s'écrit sous forme conservative avec :

$$h_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [a(u_{i+1} + u_i) - |a|(u_{i+1} - u_i)] \quad (10.30)$$

Cette écriture n'a de sens que si le point Q intersection de la caractéristique et de la droite $t = t^n$ est comprise entre les points (x_{i-1}, t^n) et (x_i, t^n) pour $a > 0$, ou (x_i, t^n) et (x_{i+1}, t^n) pour $a < 0$, on retrouve naturellement la condition CFL (10.19).

Les deux schémas présentés ci-dessous (Murman – Roe et Godunov) constituent des extensions du schéma décentré upwind, obtenu dans le cas linéaire, au cas non linéaire.

Schéma de Murman – Roe

Considérons le problème de Riemann à l'interface $x_{i+\frac{1}{2}}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial f(w)}{\partial x} = 0, \quad t \in]0; \Delta t[\\ w(x,0) = \begin{cases} u_i^n & x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ u_{i+1}^n & x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \end{array} \right. \quad (10.31)$$

Approchons ce problème de Riemann par le problème linéaire suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial w}{\partial t} + a(u_i^n, u_{i+1}^n) \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad t \in]0; \Delta t[\\ w(x,0) = \begin{cases} u_i^n & x < x_{i+\frac{1}{2}} \\ u_{i+1}^n & x > x_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \end{array} \right. \quad (10.32)$$

Où $a(u,v)$ est simplement définie par :

$$a(u,v) = \begin{cases} \frac{f(u) - f(v)}{u - v} & u \neq v \\ \frac{df}{dv}(u) & u = v \end{cases} \quad (10.33)$$

La solution de (10.32) est une discontinuité se propageant à la vitesse $a(u_i^n, u_{i+1}^n)$:

$$w(x, t^n) = w^{Roe}(x/t, u_i^n, u_{i+1}^n) = \begin{cases} u_i^n & x/t < a(u_i^n, u_{i+1}^n) \\ u_{i+1}^n & x/t > a(u_i^n, u_{i+1}^n) \end{cases} \quad (10.34)$$

Le schéma de Murman – Roe est obtenu par la résolution du problème de Riemann (10.32),(10.33) à chaque interface $x_{i+\frac{1}{2}}$. Il peut être unis sous forme conservative avec

un flux numérique donné par :

$$h_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} f(u_i^n) & a(u_i^n, u_{i+1}^n) > 0 \\ f(u_{i+1}^n) & a(u_i^n, u_{i+1}^n) < 0 \end{cases} \quad (10.35)$$

Ou de façon équivalente :

$$h_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [f(u_i^n) + f(u_{i+1}^n) - |a(u_i^n, u_{i+1}^n)|(u_{i+1}^n - u_i^n)] \quad (10.36)$$

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE
CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

Ce schéma est stable sous la condition CFL :

$$\lambda |a(u_i^n, u_{i+1}^n)| \leq 1. \quad (10.37)$$

Malheureusement, les solutions numériques obtenues avec le schéma Murmann – Roe peuvent ne pas satisfaire la condition entropique. Néanmoins il existe un moyen pour remédier à cet inconvénient et qui se résume à apporter une légère modification du flux numérique (10.36). Ceci sera traité au paragraphe 10.2.2.

Schéma de Godunov

Nous mentionnons finalement le schéma de Godunov [52] qui repose sur la résolution exacte du problème de Riemann (10.31) à chaque interface. La solution exacte d'un tel problème est auto semblable, soit :

$$w(x, t^{n+1}) = w_R((x - x_{i+1/2})/\Delta t, u_i^n, u_{i+1}^n). \quad (10.38)$$

Où la fonction w_R dépend de f et consiste en deux états constants u_i et u_{i+1} séparés par une succession d'ondes simples (ondes de détente ou de chocs), voir annexe D. On définit ensuite u_i^{n+1} par la moyenne de $w(x, t^{n+1})$ sur l'intervalle $\left] x_{i-1/2}, x_{i+1/2} \right[$:

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} w(x, t^{n+1}) dx. \quad (10.39)$$

Le schéma de Godunov est construit à partir de la relation (10.39) et peut se mettre sous la forme conservative suivante :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \lambda (f(w_R(0, u_i^n, u_{i+1}^n)) - f(w_R(0, u_{i-1}^n, u_i^n))). \quad (10.40)$$

Cette formule reste valable tant que :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max [|a(\xi)|, \xi \text{ entre } u_i \text{ et } u_{i+1}] \leq 1 \quad i \in \mathbb{S}. \quad (10.41)$$

Le schéma de Godunov se réduit au schéma décentré upwind lorsque le flux f est linéaire.

Remarque

Le schéma de Godunov implique la résolution exacte d'un problème de Riemann (non linéaire) à chaque interface. Une telle résolution est coûteuse, en particulier dans le cas envisagé plus loin d'un système hyperbolique. On s'oriente plutôt vers des méthodes approchées telles que celles déjà développées précédemment (par exemple le schéma de Murman - Roe).

10.2. Schémas monotones et TVD

Introduisons tout d'abord les notations qui seront utilisées dans la suite de ce mémoire. On écrira de manière équivalente $f(u_i^n)$ et f_i^n voire même lorsque la dépendance en temps sera évidente. On notera également $\Delta_{i+\frac{1}{2}}(\cdot) = (\cdot)_{i+1} - (\cdot)_i$, et simplement $\Delta_{i+\frac{1}{2}}$ pour $\Delta_{i+\frac{1}{2}}u$.

10.2.1. Définitions et propriétés

Monotonie et propriété TVD

Soit un schéma mis sous la forme générale :

$$u_i^{n+1} = H(u_{i-k}^n, \dots, u_{i+k}^n) \quad (10.42)$$

Ce schéma est dit monotone si H est une fonction monotone croissante de chacun de ces arguments. Un schéma monotone préserve donc la monotonie de la solution discrète et ne développe pas d'oscillations. En contrepartie de cette propriété mathématique importante, il existe un résultat négatif : un schéma mis sous forme conservative, consistant et monotone est en plus précis au premier ordre [51]. Ce second point limite l'usage des schémas monotones car on recherche généralement un ordre de précision supérieur.

On souhaite donc élargir la classe de schémas, pour cela, introduisons la notion de variation totale TVD d'une fonction discrète $u^n = (u_i^n)_{i \in \mathbb{N}}$:

$$TV(u^n) = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} |u_{i+1}^n - u_i^n| \quad (10.43)$$

Un schéma est dit du type TVD (Total Variation Diminishing on Totale décroissante) si :

$$TV[H(u)] \leq TV(u) \quad (10.44)$$

Propriétés

Un schéma TVD transforme une suite monotone en une suite monotone : on dit qu'il préserve la monotonie. Il n'introduit donc pas de nouveaux extrema dans la solution de même qu'il n'amplifie pas des extrema déjà existants. On est ainsi certain qu'un schéma du type TVD ne produit pas d'oscillations au voisinage de la discontinuité de la solution. On peut aussi remarquer que la propriété TVD est compatible avec une propriété de la solution exacte (cf. théorème 9.1)

On montre d'autre part qu'un schéma monotone est nécessairement TVD. De plus, il existe une propriété analogue à celle des schémas monotones pour les schémas TVD à

*Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE
CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE*

trois points (sous forme $u_i^{n+1} = H(u_{i-k}^n, \dots, u_{i+k}^n)$) lesquelles sont au plus précis au premier ordre .

Dans le cas d'une équation linéaire et d'un schéma linéaire (sous forme $u_i^{n+1} = \sum_{l=-k}^{i+k} C_l u_{i+l}^n, n > 0, i \in \mathbb{N}$, où les C_l sont des constantes), les trois notions, monotonicité, préservation de monotonicité et propriété TVD sont équivalente. Le schéma est alors au mieux précis au premier ordre. Il est ainsi impossible de construire un schéma TVD linéaire précis au deuxième ordre. Les schémas TVD précis au deuxième ordre sont donc intrinsèquement non linéaire et même dans le cas d'une équation linéaire, il ne sera pas possible de les mettre sous la forme ci-dessus.

Caractérisation de la propriété TVD

Il existe une condition suffisante permettant de vérifier si un schéma est TVD (Harten , [56]) . Cette condition s'exprime simplement si le schéma est mis sous forme incrémental, c'est-à-dire si le flux numérique $h_{i+\frac{1}{2}}$ est écrit comme :

$$\begin{aligned} h_{i+\frac{1}{2}} &= h(u_{i-k+1}, \dots, u_{i+k}) = f_i - \frac{1}{\lambda} C_{i+\frac{1}{2}}^+ \Delta_{i+\frac{1}{2}} \\ &= f_{i+\frac{1}{2}} - \frac{1}{\lambda} C_{i+\frac{1}{2}}^- \Delta_{i+\frac{1}{2}} \end{aligned} \tag{10.45}$$

Où $C_{i+\frac{1}{2}}^\pm = C^\pm(u_{i-k+1}, \dots, u_{i+k})$ sont des fonctions bornées. On dit de même que le schéma est mis sous forme visqueuse si on peut l'écrire :

$$h_{i+\frac{1}{2}} = h(u_{i-k+1}, \dots, u_{i+k}) = \frac{1}{2} (f_{i+\frac{1}{2}} + f_i) - \frac{1}{2\lambda} q_{i+\frac{1}{2}} \Delta_{i+\frac{1}{2}} \tag{10.46}$$

Où $q_{i+\frac{1}{2}} = q(u_{i-k+1}, \dots, u_{i+k})$ est une fonction bornée. Dans le cas de schéma à trois point les coefficients C^\pm et q sont définis de façon unique et vérifient la relation :

$$q_{i+\frac{1}{2}} = C_{i+\frac{1}{2}}^- + C_{i+\frac{1}{2}}^+ \tag{10.47}$$

Une condition suffisante pour qu'un schéma écrit sous la forme incrémentale (10.45) soit TVD est [56] :

$$C_{i+\frac{1}{2}}^\pm \geq 0 \quad \& \quad C_{i+\frac{1}{2}}^+ + C_{i+\frac{1}{2}}^- \leq 1 \quad \forall i \tag{10.48}$$

Dans le cas d'un schéma à trois points, cette condition est nécessaire et suffisante. On peut toutefois souligner que dans le cas global, cette condition n'est que suffisante, il peut donc exister des schémas qui ne satisfont pas la relation (10.48) et qui sont TVD. Pour un schéma écrit sous forme visqueuse, la condition (10.48) devient :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \left| \frac{f_{i+1} - f_i}{u_{i+1} - u_i} \right| \leq q_{i+\frac{1}{2}} \leq 1 \quad \forall i \tag{10.49}$$

Afin d'apprécier ce qui a été écrit précédemment On peut citer certains exemples d'illustration tel que :

- le schéma de Lax – Friedrichs est monotone sous la condition $\max|df/dv| \leq 1$ est du type TVD sous la condition $\lambda \left| \Delta f_{i+\frac{1}{2}} / \Delta u_{i+\frac{1}{2}} \right| \leq 1$.
- le schéma de Lax – Wendroff n'est pas du type TVD
- le schéma de Murman – Roe est TCD sous la condition : $\lambda \left| \Delta f_{i+\frac{1}{2}} / \Delta u_{i+\frac{1}{2}} \right| \leq 1$.
- le schéma de Godunov est monotone et par conséquent TVD

10.2.2. Consistance avec la condition d'entropie

Théorème de convergence

On dit qu'un schéma numérique est consistant avec la condition d'entropie s'il existe un flux numérique \mathcal{H} consistant avec le flux entropique \mathfrak{S} défini par (9.17) :

$$\mathcal{H}(u, u, \dots, u) = \mathfrak{S}(u) \quad (10.50)$$

Et tel que l'inégalité entropique de maille ci-dessous soit satisfaite :

$$\mathcal{U}(u_i^{n+1}) \leq \mathcal{U}(u_i^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{H}(u_{i-k+1}^n, \dots, u_{i+k}^n) - \mathcal{H}(u_{i-k}^n, \dots, u_{i+k-1}^n) \right) \quad (10.51)$$

Où \mathcal{U} est la fonction entropique du problème. Un tel schéma sera simplement nommé schéma entropique.

A titre consultatif, Harten et Lax [60] ont établi le théorème suivant qui complète les résultats du théorème 10.1 cité précédemment :

Théorème 10.2

Supposons que les hypothèses du théorème 10.1 soient vérifiées et que de plus , le schéma soit consistant avec une condition d'entropie.

Alors la limite v du théorème 10.1 est l'unique solution entropique de 10.1

On montre par ailleurs que les schémas monotones consistants sont entropiques. Il n'en est pas automatiquement de même pour les schémas TVD, ainsi que nous allons le voir.

Schéma de Murman – Roe : modification de Harten

Exemple d'une onde de choc stationnaire

Comme nous l'avons déjà indiqué, les solutions obtenues avec le schéma de Murman – Roe peuvent ne pas satisfaire la condition entropique. Considérons par exemple une onde de choc stationnaire [55], la solution exacte satisfait les conditions de Rankine – Hugoniot (9.8) et les conditions de jump pour l'entropie (9.12), ce qui donne $s = 0$ et en choisissant une discontinuité en $x = 0$:

$$v(x) = \begin{cases} v_- & x < 0 \\ v_+ & x > 0 \end{cases} \quad f(v_+) = f(v_-) \quad f'(v_-) > 0 > f'(v_+). \quad (10.52)$$

Où $f' = df/dv$, il faut bien remarquer que la solution (10.52) avec $f'(v_+) > 0 > f'(v_-)$ n'est pas une discontinuité admissible puisque la condition d'entropie n'est pas vérifiée.

Supposons donc que les états v_+ et v_- satisfont $f(v_+) = f(v_-)$ et appliquons maintenant le schéma de Murman – Roe, en prenant comme condition initiale :

$$u_i^0 = \begin{cases} v_- & i \leq -1 \\ v_+ & i > 0 \end{cases} \quad (10.53)$$

On obtient ainsi en chaque point et à tout instant :

$$u_i^n = u_i^0 \quad \forall i, \forall n \quad (10.54)$$

Sans qu'aucune condition sur $f'(v_-)$ et $f'(v_+)$ n'intervienne. Dans le cas où $f'(v_+) > 0 > f'(v_-)$, le schéma de Murman – Roe conduit alors à une solution non physique.

Reprenons maintenant la forme visqueuse (10.46) écrite de manière plus compacte : $h_{i+1/2} = 1/2(f_i + f_{i+1}) - 1/(2\lambda)d(u_i, u_{i+1})$. La condition entropique (cf 10.52) se traduit alors pour la fonction $d(u, v)$ par :

$$d(u_i, u_{i+1}) = 0 \quad \text{si} \quad f(u_{i+1}) = f(u_i) \quad \text{et} \quad f'(u_i) > 0 > f'(u_{i+1}) \quad (10.55)$$

$$d(u_i, u_{i+1}) \neq 0 \quad \text{si} \quad f(u_{i+1}) = f(u_i) \quad \text{et} \quad f'(u_{i+1}) > 0 > f'(u_i)$$

Pour le schéma de Murman – Roe, la fonction $d(u, v)$ est définie par :

$$d(u_i, u_{i+1}) = \left| a_{i+1/2} \right| (u_{i+1} - u_i) \quad \text{avec} \quad a_{i+1/2} = \Delta_{i+1/2} f / \Delta_{i+1/2} u. \quad (10.56)$$

On voit que lorsque $f(u_{i+1}) = f(u_i)$ on a automatiquement $a_{i+1/2} = 0$ soit $d(u_i, u_{i+1}) = 0$ sans que la condition d'entropie n'intervienne. Pour ce schéma, la viscosité numérique s'annule donc avec la vitesse caractéristique ce qui est à l'origine

de l'apparition de solutions non physiques. Harten [51] a proposé une nouvelle approche du schéma de Murman – Roe, vérifiant la condition entropique en modifiant la viscosité numérique de façon à ce qu'elle ne s'annule plus systématiquement avec la vitesse caractéristique.

Modification de Harten

Harten [59] a proposé une modification du schéma de Murman – Roe pour le rendre entropique en introduisant une quantité suffisante de dissipation numérique (artificielle) dans le flux numérique pour sélectionner la solution entropique. Reprenons la forme visqueuse (10.46) et considérons des fonction $q_{i+\frac{1}{2}}$ telles que :

$$q_{i+\frac{1}{2}} = Q\left(\lambda a_{i+\frac{1}{2}}, \varepsilon_{i+\frac{1}{2}}\right) \quad (10.57)$$

Avec

$$Q(x, \varepsilon) = \begin{cases} \varepsilon & |x| < \varepsilon \\ |x| & |x| \geq \varepsilon \end{cases} \quad (10.58)$$

Ou

$$Q(x, \varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\varepsilon} + \varepsilon \right) & |x| < \varepsilon \\ |x| & |x| \geq \varepsilon \end{cases} \quad (10.59)$$

Ces fonctions sont des approximations positives de $|x|$; la première est simplement continue tandis que la deuxième est continûment différentiable, cf figure 10.4. la fonction $q_{i+\frac{1}{2}}$ ainsi modifiée correspond à la fonction d'origine lorsque $\lambda a_{i+\frac{1}{2}} > \varepsilon$ mais ne s'annule plus pour $a_{i+\frac{1}{2}} = 0$.

Si $0 \leq \varepsilon \leq 1$, le schéma défini par (10.57) est TVD pour $CFL \leq 1$ (la condition (10.49) est vérifiée).

Nous appellerons dorénavant : schéma de Harten, le schéma à trois points, consistant, avec la condition d'entropie, TVD et précis au premier ordre en espace et en temps :

$$h_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(f_{i+1} + f_i - \psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (10.60)$$

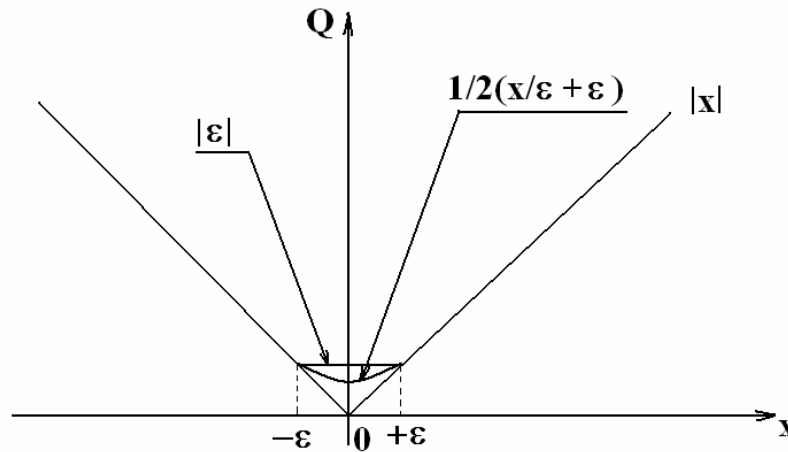


Figure 10.4: Approximation de $|x|$

Avec $\Delta_{i+1/2} = (u_{i+1} - u_i)$ et

$$\psi(z) = \begin{cases} |x| & |x| \geq \delta, \\ \frac{z^2 + \delta^2}{2\delta}, & |x| < \delta. \end{cases} \quad (10.61)$$

10.3. Schémas TVD du deuxième ordre

Les schémas numériques du premier ordre en espace sont généralement trop dissipatifs et ont tendance en particulier à étaler les discontinuités. Afin d'améliorer la capture des discontinuités, on cherchera donc à accroître la précision du schéma en ordre deux par exemple ou de façon équivalente, à réduire sa diffusivité. Toutefois la stabilité du schéma, dans les zones à fort gradient de la solution, ne pourra être assurée qu'en maintenant une certaine quantité de diffusion numérique. Pour les schémas standard et classiques de capture de l'onde de choc, cette diffusion numérique, introduite à l'aide d'opérateurs linéaires, tend à être répartie dans l'ensemble du domaine de calcul. En revanche, les schémas d'actualités de capture d'onde de choc mettent en jeu des opérateurs non linéaires (dépendant localement de la solution), qui permettent de concentrer la diffusion numérique dans les zones de discontinuité de la solution.

Les premiers schémas de ce type ont été proposés par Boris et Book en 1973 [19], [20] et [21] avec la méthode du Flux corrected transport (FCT). Ils combinent des schémas précis au premier et deuxième ordre dans une méthode à deux pas :

- Prédicteur (prédicateur) : un schéma monotone à trois points précis au premier ordre est d'abord utilisé

- Corrector (correcteur) : pour obtenir une précision supérieure, on ajoute un flux antidiffusif. Ce correcteur est limité de manière à préserver la monotonie et la positivité. Le schéma ne peut ainsi introduire de nouveaux extrêmes.

Pendant les années qui suivirent de nombreux chercheurs et auteurs d'ouvrages scientifiques : Van Leer [135], [136] et [137], Warming et Beam [147], Roe [103], Sweby [129] et Chacravarty [28] ...etc, ont construit des schémas reposant sur le même principe du passage de l'ordre un à l'ordre deux par l'intermédiaire de "flux limiters" (limiteurs de flux). L'obtention d'un schéma TVD de haute résolution est basée sur un schéma entropique précis à l'ordre un auquel on a ajouté un flux anti-dissipatif limité. La différence avec la méthode dite FCT réside dans le fait que ces schémas n'ont qu'un sel pas.

Harten en 1983 [55] a élaboré un schéma TVD précis au deuxième ordre dans les régions régulières mais qui reste du premier ordre aux extrêmes. Sa méthode, qui repose sur l'application d'un schéma du premier ordre en espace à un flux modifié, est décrite dans la section suivante.

Enfin, de nombreux travaux ont concerné l'extension à un ordre de précision supérieur du schéma de Godunov. Ces développements reposent sur le même principe d'une méthode à trois pas :

- Reconstruction : construction d'une fonction polynomiale par morceaux à partir des valeurs moyennes u_i^n sur chaque maille
- Evolution : évolution de la solution polynomiale reconstruite à l'aide de la solution (exacte ou approchée) d'un problème de Riemann
- Average (moyenne) : les valeurs moyennes u_i^{n+1} sont calculées par intégration sur chaque maille de la solution provenant de l'étape précédente

La méthode MUSCL (Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws) proposée par Van Leer [138] et [139] en constitue le premier exemple. Il utilise une fonction linéaire par morceaux pour la reconstruction. Ensuite, Collela et Woodward [32] dans leur méthode PPM (Piecewise Parabolic Method) ont utilisé une fonction parabolique par morceaux. Dans ces deux cas, la propriété TVD est assurée par une contrainte sur la fonction polynomiale.

L'évolution des schémas numériques montre une tendance à relâcher quelque peu la propriété TVD qui impose une précision d'ordre un aux extrêmes. On introduit alors des schémas TVB (Total Variation Boundary - limits) qui peuvent retenir un ordre de précision supérieur à un aux extrêmes [119], ou les schémas ENO (Essentially Non oscillatory) développés principalement par Harten, Osher, Shu, Enquist et Chakravarty (cf respectivement [57],[62],[120],[121] et [58]). Ces schémas maintiennent un ordre de précision supérieur à un aux extrêmes mais peuvent éventuellement accentuer un extrémum. Le principe de leur construction est semblable à celui décrit plus haut : il fait appel aux trois étapes de construction, évolution et average. La différence essentielle se trouve dans la procédure locale de construction. Elle est réalisée à l'aide d'un polynôme de degré $(p - 1)$ dont la variation totale n'est plus

maintenant strictement bornée par celle de la solution discrète approximée. Les opérateurs évolution et average conservant la propriété TVD, on obtient ainsi que la variation totale de la solution à l'instant $n + 1$ vérifie :

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) + O(\Delta x^p) \quad (10.62)$$

Ces schémas font encore l'objet de développements théoriques et leur application n'est pas envisagée dans ce travail.

Dans les sections suivantes, nous introduirons le schéma à flux modifié de Harten, ainsi que les schémas à limiteurs de flux décentrés de Harten – Yee et centrés de Yee – Roe – Davis,

10.3.1. Flux modifié de Harten

Construction

Pour construire un schéma TVD à cinq points précis au deuxième ordre, Harten [55] a appliqué son schéma TVD à trois points précis au premier ordre (10.60) à un flux modifié $\tilde{f} = f + g$. Cette idée s'appuie sur le fait que la solution exacte d'une loi de conservation scalaire hyperbolique possède la propriété TVD quelle que soit la forme précise du flux. De même, le schéma du premier ordre (10.60) est TVD sous la condition (10.48) qui peut être appliquée à un flux quelconque (l'expression des coefficients C^\pm dépendent bien sûr du flux considéré). Appliquant donc le schéma (10.60) au flux modifié \tilde{f} , le flux numérique correspondant $\tilde{h}_{i+1/2}$ s'écrira :

$$\tilde{h}_{i+1/2} = \frac{1}{2}(f_{i+1} - f_i) + \frac{1}{2}(g_{i+1} - g_i) - \frac{1}{2}\psi\left(a_{i+1/2} + \gamma_{i+1/2}\right)\Delta_{i+1/2} \quad (10.63)$$

où $\gamma_{i+1/2} = \left(g_{i+1/2} - g_i\right)\Delta_{i+1/2}$. Un développement en série de Taylor montre qu'en choisissant g de la forme suivante :

$$g = \frac{1}{2}\Delta x\sigma(a)\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) + O(\Delta x^2) \quad (10.64)$$

On peut obtenir une approximation d'ordre deux en définissant α permet d'obtenir des solutions stationnaires indépendantes de Δt . Pour des applications instationnaires, avec le choix $\sigma(x) = \frac{1}{2}(\psi(x) - \lambda z^2)$ on obtient une précision d'ordre deux à la fois en espace et en temps.

Propriétés

Pour assurer la propriété TVD, $\gamma_{i+\frac{1}{2}}$ doit être borné. Cela introduit une limitation sur la correction g de la forme :

$$g_i = S \max \left[0, \min \left(\sigma \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right|, S \sigma \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right| \right) \right] \quad (10.65)$$

$$\text{où } S = \text{signe} \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \right)$$

On peut vérifier que γ est bornée, puisque :

$$\begin{aligned} \left| \gamma_{i+\frac{1}{2}} \right| &= \left| \frac{g_{i+1} - g_i}{\Delta_{i+\frac{1}{2}}} \right| \\ |g_{i+1} - g_i| &\leq \max(|g_i|, |g_{i+1}|) \\ &\leq \max \left[\min \left(\sigma \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right|, S \sigma \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right| \right), \right. \\ &\quad \left. \min \left(\sigma \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right|, S \sigma \left(a_{i+\frac{3}{2}} \right) \left| \Delta_{i+\frac{3}{2}} \right| \right) \right] \\ &\leq \sigma \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right| \end{aligned}$$

soit

$$\left| \gamma_{i+\frac{1}{2}} \right| \leq \sigma \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right)$$

Enfin, on peut remarquer que g_i s'annule si $\Delta_{i+\frac{1}{2}}$ et $\Delta_{i-\frac{1}{2}}$ n'ont pas le même signe (ce qui correspond à un extrema local de u), la précision du schéma est alors localement réduite à l'ordre un en ce point.

Le schéma est maintenant un schéma à cinq points (car $g_i = g_i(u_{i-1}, u_i, u_{i+1})$) implique bien que $\tilde{h}_{i+\frac{1}{2}} = \tilde{h}_{i+\frac{1}{2}}(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}, u_{i+2})$, dont la consistance s'écrit : $g(u, u, u) = 0$. La consistance globale du flux numérique prend une forme légèrement différente de celle donnée pour un schéma à cinq points habituel puisqu'on peut écrire :

$$\tilde{f}(v, u, u, u, w) = f(u) \quad (10.66)$$

On dit dans ce cas que le schéma est essentiellement à trois points.

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

On peut par ailleurs souligner que si $|a| \geq \delta$, le signe de la vitesse caractéristique \tilde{a} est le même que le signe de la vitesse caractéristique a et f , cela signifie que le schéma reste décentré par rapport à la vitesse caractéristique à la vitesse caractéristique du flux original [160].

Remarque

On peut vérifier que le flux g est bien un flux antidissipatif. En effet, le schéma TVD de Harten (10.60) est une approximation au premier ordre de (10.1) mais du deuxième ordre pour l'équation modifiée :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma(a) \frac{\partial v}{\partial x} \right] \quad (10.67)$$

la condition TVD imposant que $\sigma(a) \geq 0$, le terme de droite de (10.67) est bien le terme positif : il représente un terme de dissipation .L'introduction du flux modifié $\bar{f} = f + g$ permet ainsi d'annuler les effets de cette dissipation : g est bien un flux anti-diffusif .

10.3.2. Limiteurs de flux

La construction d'un grand nombre de schémas TVD du second ordre repose sur le principe de "limitation des flux " [129]. Le second ordre est en effet obtenu par l'apport d'un flux antidissipatif mais ce dernier doit être limité pour assurer la propriété TVD . Nous présentons ici une formulation unifiée due à Yee [157] d'une classe de schémas TVD précis au deuxième ordre et dont le flux numérique $h_{i+1/2}$ s'exprime de façon générale comme étant la somme d'un terme centré et d'un terme de dissipation :

$$h_{i+1/2} = \frac{1}{2} \left(f_{i+1} + f_i + \phi_{i+1/2} \right) \quad (10.68)$$

Les schémas suivants ne diffèrent que par l'expression de la fonction ϕ .

Schéma décentré upwind du deuxième ordre de Harten – Yee

Yee [157] a proposé une version moins dissipative du schéma du deuxième ordre de Harten en factorisant le terme $\sigma(a_{i+1/2})$ dans (10.65). Elle obtient ainsi un schéma qui est TVD seulement pour une coefficients constants mais qui donne néanmoins de très bons résultats . La fonction ϕ s'écrit alors :

$$\phi_{i+1/2} = \sigma(a_{i+1/2})(g_{i+1} - g_i) - \psi(a_{i+1/2} + \gamma_{i+1/2})\Delta_{i+1/2} \quad (10.69)$$

La fonction limiteur g_i peut être l'une des fonctions suivantes :

$$g_i = \min \text{mod} \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}}, \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (10.70)$$

$$g_i = \frac{\left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \Delta_{i-\frac{1}{2}} + \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right| \right)}{\Delta_{i+\frac{1}{2}} + \Delta_{i-\frac{1}{2}}} \quad (10.71)$$

$$g_i = \frac{\left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \left[\left(\Delta_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 + \delta_2 \right] + \Delta_{i-\frac{1}{2}} \left[\left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \delta_2 \right] \right)}{\left(\left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 + 2\delta_2 \right)} \quad (10.72)$$

$$g_i = \min \text{mod} \left(2\Delta_{i-\frac{1}{2}}, 2\Delta_{i+\frac{1}{2}}, \frac{1}{2} \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}} + \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right) \right) \quad (10.73)$$

$$g_i = S \max \left[0, \min \left(2 \left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right|, S \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right), \min \left(\left| \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right|, 2S \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (10.74)$$

où $S = \text{signe} \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} \right)$. Si $\left(\Delta_{i-\frac{1}{2}} + \Delta_{i+\frac{1}{2}} \right) = 0$, on prend $g_i = 0$ dans (10.71); δ_2 dans (10.72) est un paramètre dont le seul but est d'empêcher la division par zéro, en pratique, $10^{-7} \leq \delta_2 \leq 10^{-5}$. La fonction minmod est définie comme suit :

$$\min \text{mod}(x_1, \dots, x_k) = \text{sign}(x_1) \max \left(0, \min \left(|x_1|, x_2 \text{sign}(x_1), \dots, x_k \text{sign}(x_1) \right) \right).$$

Le premier limiteur (10.70) est le limiteur minmod de Roe, le deuxième limiteur (10.71) a été proposé par Van Leer [136], c'est une variante du troisième (10.72) donné par Van Albada et al [4]. Le quatrième (10.73) est du à Collela et Woodward [149] tandis que le cinquième (10.74), connu sous le nom de "superbee", fut introduit par Roe [104]. Les limiteurs sont classés ici du premier au cinquième par ordre de dissipativité décroissante.

Illustration

Une représentation graphique permet de mieux comprendre et cerner le fonctionnement des limiteurs. Introduisons le rapport de deux pentes consécutives $r = \Delta_{i-\frac{1}{2}} / \Delta_{i+\frac{1}{2}}$ les fonctions g_i sont ainsi transformées en fonctions $\varphi(r)$.

On montre que si $\varphi(1) = 1$ et si φ admet une dérivée à droite et à gauche au point $r = 1$, une précision de deuxième ordre est obtenue dans la zone de régularité de la fonction et en dehors des extrema non coniques [51]. De plus, si φ prend ses valeurs dans le domaine hachuré de la figure 10.5, le schéma résultant est TVD.

Le premier limiteur (10.70) représente la frontière inférieure de ce domaine tandis que le limiteur superbee (10.74) suit la limite supérieure du domaine. Une représentation graphique de limiteurs minmod, Van Leer et superbee est donnée sur la figure 10.6

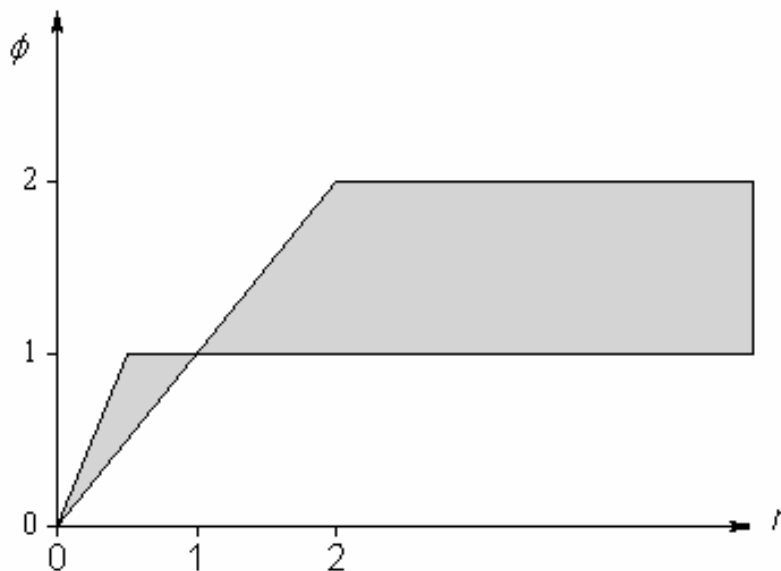


Figure 10.5 : Domaine où le schéma est TVD

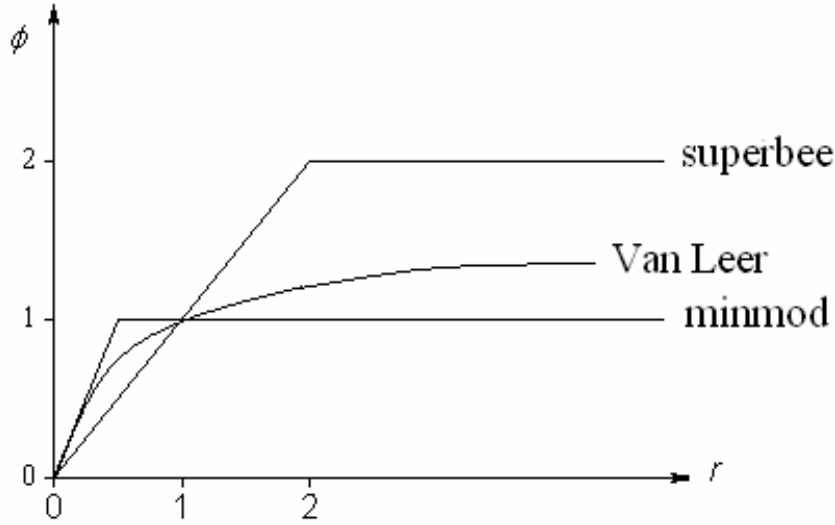


Figure 10.6 : Représentation des différents limiteurs

Schéma symétrique du deuxième ordre de Yee - Roe - Davis

Le schéma précédent est un schéma décentré dans le sens où le terme de dissipation $\phi_{i+\frac{1}{2}}$ dépend du signe de la vitesse caractéristique. Dans le schéma suivant, la dissipation ne dépend pas du signe de la vitesse caractéristique. Le schéma résultant s'avère un peu plus diffusif mais en contre partie, moins coûteux de mise en œuvre. La fonction ϕ s'exprime maintenant par [158] :

$$\phi_{i+\frac{1}{2}} = -\psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}} - \tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (10.75)$$

Là encore, plusieurs choix sont possibles pour la fonction limiteur $\tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}}$ parmi

lesquels :

$$\tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}}, \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right) + \min \text{mod} \left(\Delta_{i+\frac{1}{2}}, \Delta_{i-\frac{3}{2}} \right) - \Delta_{i+\frac{1}{2}} \quad (10.76)$$

$$\tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}}, \Delta_{i+\frac{1}{2}}, \Delta_{i-\frac{3}{2}} \right) \quad (10.77)$$

$$\tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(2 \Delta_{i-\frac{1}{2}}, 2 \Delta_{i+\frac{1}{2}}, 2 \Delta_{i+\frac{3}{2}}, \frac{1}{2} \left(\Delta_{i-\frac{1}{2}} - \Delta_{i+\frac{3}{2}} \right) \right) \quad (10.78)$$

10.4. Schémas TVD implicites

On a vu dans les sections précédentes qu'il était possible de construire des schémas TVD d'un ordre supérieur sous des conditions de type CFL, par exemple : $\lambda a_{i+\frac{1}{2}} \leq 1$ (voir paragraphe 10.2.1). On souhaitera s'affranchir de ces contraintes, en particulier dans la perspective des applications stationnaires qui nous intéresseront par la suite. Pour ces applications en effet, on désire avant tout une convergence rapide vers la solution stationnaire. Cet objectif sera réalisé par l'utilisation d'une forme implicite des schémas TVD explicites présentés ci-dessus.

10.4.1. Propriété TVD

H. C. Yee [158] présente une discrétisation de (10.1) sous une forme générale à un paramètre θ compris entre 0 et 1 :

$$u_i^{n+1} + \lambda\theta \left(h_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - h_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = u_i^n - \lambda(1-\theta) \left(h_{i+\frac{1}{2}}^n - h_{i-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (10.79)$$

Pour $\theta = 0$ on retrouve la discrétisation explicite tandis que si $\theta \neq 0$ la discrétisation en temps est implicite. En particulier, pour $\theta = 1$ on retrouve le schéma Euler implicite. Pour déterminer la forme prise par la propriété TVD dans le cas d'une discrétisation implicite, on peut réécrire l'équation (10.79) comme suit :

$$L.u^{n+1} = R.u^n \quad (10.80)$$

où L et R sont les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} (L.u)_i &= u_i + \lambda\theta \left(h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}} \right) \\ (R.u)_i &= u_i - \lambda(1-\theta) \left(h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (10.81)$$

Une condition suffisante pour que le schéma défini par (10.79) soit TVD est alors donnée immédiatement par [56] :

$$\begin{aligned} TV(R.u^n) &\leq TV(u^n) \\ TV(L.u^{n+1}) &\geq TV(u^{n+1}) \end{aligned} \quad (10.82)$$

Par ailleurs, écrivant (10.79) sous la forme incrémentale (10.47) on obtient :

$$\begin{aligned}
 u_i^{n+1} - \theta \left(C^+ \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \Delta_{i+\frac{1}{2}} - C^- \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right)^{n+1} \\
 = u_i^n + (1-\theta) \left(C^+ \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \Delta_{i+\frac{1}{2}} - C^- \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \Delta_{i-\frac{1}{2}} \right)^n
 \end{aligned} \tag{10.83}$$

La condition suffisante (analogue à la condition (10.48) obtenue dans le cas explicite) pour que le schéma (10.79) possède la propriété TVD est alors :

$$\begin{cases}
 (1-\theta) C^- \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \geq 0 \\
 (1-\theta) C^- \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \geq 0 \\
 (1-\theta) \left[C^- \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) + C^+ \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] \leq 1 \\
 \infty < C \leq -\theta C^\pm \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \leq 0 \text{ pour tout } C \text{ fini}
 \end{cases} \tag{10.84}$$

le schéma Euler implicite ($\theta = 1$) est donc inconditionnellement TVD (sous réserve que les C^\pm soient positifs). On peut d'autre part remarquer que le développement précédent reste valable en remplaçant $a_{i+\frac{1}{2}}$ par $\tilde{a}_{i+\frac{1}{2}}$ dans le cas du schéma de Harten précis à l'ordre deux. Ce schéma sera donc également inconditionnellement TVD pour $\theta=1$.

10.4.2. Linéarisation

Dans le cas d'une discrétisation implicite ((10.79) avec $\theta \neq 0$), u^{n+1} est solution d'une équation non linéaire dont la résolution directe n'est généralement pas possible. On va donc rechercher une forme linéarisée approchée. Yee [158] propose principalement deux versions. La première repose sur la forme incrémental (10.83) de l'équation discrétisée. Celle-ci est linéarisée en gelant simplement les coefficients C^\pm dans le membre de gauche à leurs valeurs à l'instant n . On obtient ainsi une forme conservative en temps mais qui reste inconditionnellement TVD et qui est telle que le système linéaire obtenu est à dominance diagonale. Dans ce travail, nous avons préféré utiliser la deuxième méthode proposée par Yee, qui conduit à une forme conservative mais dont il n'est plus garanti qu'elle soit inconditionnellement TVD.

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE
CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

De même, la dominance diagonale n'est plus assurée [27]. Néanmoins, en pratique, cette version a fait preuve de bonnes propriétés de convergence et de précision, pour des valeurs modérées du CFL [14]. Cette méthode reprend la forme générale (10.68) du flux numérique. La linéarisation de $h_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ nécessite la linéarisation de f_i^{n+1} et $\phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$:

$$h_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(f_i^{n+1} + f_{i+1}^{n+1} + \phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \quad (10.85)$$

La linéarisation de f^{n+1} se fait à l'aide d'un développement de Taylor :

$$f_i^{n+1} - f_i^n \approx a_i^n (u_i^{n+1} - u_i^n) \quad (10.86)$$

et celle du flux ϕ^{n+1} par factorisation :

$$\phi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \approx \bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^n (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \quad (10.87)$$

en introduisant $d_i = u_i^{n+1} - u_i^n$ pour alléger les notations , on obtient :

$$e_1 d_{i-1} + e_2 d_i + e_3 d_{i+1} = -\lambda \left(h_{i+\frac{1}{2}}^n - h_{i-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (10.88)$$

avec

$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{\lambda \theta}{2} \left[-a_{i-1} + \bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}} \right]^n \\ e_2 &= 1 - \frac{\lambda \theta}{2} \left[\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}} \right]^n \\ e_3 &= \frac{\lambda \theta}{2} \left[a_{i+1} + \bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} \right]^n \end{aligned} \quad (10.89)$$

On voit ainsi que cette procédure de linéarisation conduit, pour un schéma à cinq points. A un système linéaire tridiagonal à résoudre. Pour des applications stationnaires,

on peut opérer une approximation supplémentaire, qui réduira qualitativement le coût de la méthode, en ne retenant dans les coefficients e_i que la contribution du premier ordre en espace. La précision de la solution à convergence demeure inchangée puisqu'elle est donnée par le membre de droite. Par exemple, pour les schémas présentés dans la section 10.3.2, les coefficients s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 e_1 &= \frac{\lambda\theta}{2} \left[-a_{i-1} - \psi \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \right]^n \\
 e_2 &= 1 - \frac{\lambda\theta}{2} \left[\psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) + \psi \left(a_{i-\frac{1}{2}} \right) \right]^n \\
 e_3 &= \frac{\lambda\theta}{2} \left[a_{i+1} - \psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \right]^n
 \end{aligned} \tag{10.90}$$

on remarque qu'alors la dominance diagonale est assurée. L'application du schéma de Harten – Yee décentré du deuxième ordre implicite au calcul de la solution stationnaire pour un problème de réflexion de choc [160] a montré que l'opérateur implicite du premier ordre conduisait à une meilleure convergence que l'opérateur implicite du deuxième ordre .

10.5. Equation de conservation scalaire avec terme source

Pour étudier l'influence sur la solution de l'introduction de termes sources dans une équation de conservation scalaire hyperbolique, considérons le problème suivant :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} &= \omega(v) & x \in \mathfrak{R}, & \quad t \in [0, T] \\
 v(x, 0) &= v_0(x)
 \end{aligned} \tag{10.91}$$

Propriétés de la solution exacte

La solution exacte de (10.91) n'est généralement plus à variation totale décroissante mais la variation totale est simplement bornée (TVB).

Le long d'une courbe caractéristique d'équation $dx/dt = a(v)$, la solution v de (10.91) n'est plus constante mais elle vérifie maintenant $dv/dt = \omega(v)$. Les caractéristiques ne sont donc plus rectilignes mais courbes.

Conséquences

D'un point de vue numérique, les algorithmes existants reposent sur la résolution du problème de Riemann sans terme source alors qu'en réalité il y'a un couplage entre les termes sources et les termes convectifs. Il faudrait en fait s'intéresser au problème de Riemann généralisé [15].

Une conséquence importante de la présence du terme source ω , du point de vue numérique, est la possibilité d'observer des discontinuités se propageant à des vitesses incorrectes (voir section 10.5.1) et de façon plus générale, d'obtenir des solutions parasites (C'est-à-dire qui sont de purs artifacts numériques) stables. Ce dernier problème est dû au caractère fortement non linéaire du terme source ω et à l'influence significative de la discrétisation sur la dynamique non linéaire du système discret [76],[75]et[159].

Enfin, et en envisageant le cas général d'un système d'équations du type (10.91), les termes sources $\omega(v)$ introduisent de nouvelles échelles de temps, pouvant être très différentes (ordre de grandeur) les unes des autres et aussi très différentes du temps caractéristique de la convection. En particulier, si les temps caractéristiques associés aux termes sources sont petits devant le temps caractéristique des termes convectifs, on aura un problème raide. Pour des raisons de stabilité, le pas en temps doit s'accorder sur l'échelle de temps la plus rapide, ce qui peut imposer des restrictions sévères. Dans les sections qui suivent nous donnerons des algorithmes pour limiter cette contrainte.

10.5.1. Etude d'une équation avec terme source

LeVêque et Yee [82] ont étudié l'équation modèle :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = \omega(v) = -\mu v(v-1) \left(v - \frac{1}{2} \right) \quad (10.92)$$

avec $f(v) = av$ et où μ représente la raideur du système (plus μ est grand plus le système est raide). Ils ont appliqué différentes méthodes numériques et ont montré que certaines d'entre elles, bien que stables, pouvaient donner lieu à de vitesses de propagation de discontinuités incorrectes lorsque la raideur du système augmente. Collela et al. [31] ont observé le même phénomène lors de l'étude des équations d'Euler prenant en compte une équation pour la fraction massique de gaz non brûlé dans le cas

de la détonation. Flament et Coquel [45] ont généralisé cette étude en prenant un terme source de la forme $(v - v_g)(v - v_d)/\tau$ où τ est un temps de relaxation et ont décrit le processus d'apparition d'une oscillation au pied du choc si le pas en temps devient trop grand.

Pour illustrer ce problème de propagation de discontinuités à des vitesses incorrectes, reprenons les notations de l'introduction de la partie numérique. Pour une méthode volumes finis, la moyenne du terme source sur un volume de contrôle est donnée dans le cas scalaire par :

$$\omega_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \omega[v(x, t^n)] dx \quad (10.93)$$

L'approximation numérique de ω_i^n doit donc correctement représenter (10.93) pour obtenir le bon comportement de la solution. Considérons par exemple la propagation d'une onde de choc d'intensité unité (voir figure 10.7).

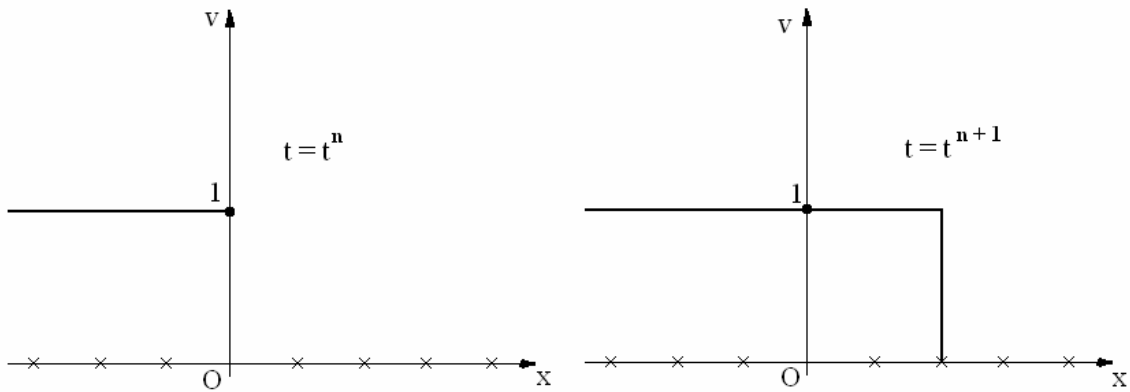


Figure 10.7: Propagation d'une onde de choc

On peut définir simplement la vitesse s de propagation de l'onde de choc par :

$$s = \frac{\Delta x}{\Delta t} \left(\sum_i u_i^{n+1} - \sum_i u_i^n \right) \quad (10.94)$$

or, pour une équation de conservation scalaire hyperbolique homogène, une discrétisation conservative s'écrit :

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (10.95)$$

la sommation des u_i^{n+1} sur tout le domaine entraîne l'annulation deux à deux des termes de flux et ne laisse que les valeurs des flux aux frontières. On retrouve ainsi le comportement de la solution exacte, avec la bonne vitesse de propagation.

Chapitre 10 : SCHEMAS TVD POUR UNE EQUATION DE CONSERVATION SCALAIRE HYPERBOLIQUE

Pour une équation de conservation scalaire hyperbolique non homogène, la sommation des u_i^{n+1} sur tout le domaine fait apparaître la somme des contributions ω_i^n et l'obtention d'une vitesse de propagation correcte nécessite donc la représentation numérique adéquate de ces valeurs moyennes $\omega_i^n = (1/\Delta x) \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \omega[v(x, t^n)] dx$.

Pour l'équation (10.92) par exemple, le terme source est nul de part et d'autre de la discontinuité choisie (cf figure 10.7) et par conséquent l'intégrale $\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \omega[v(x, t^n)] dx$ aussi. Cependant, la représentation numérique de cette intégrale par $\omega_i^n = \omega(u_i^n)$ n'est pas nulle si, par exemple, le schéma numérique introduit un état intermédiaire u_0^n tel que $u_0^n \neq 0, u_0^n \neq 1/2$ et $u_0^n \neq 1$. La vitesse s de propagation de la discontinuité, donnée par l'équation (10.94), va alors être altérée par la présence de cet état intermédiaire (qui n'est pas présents dans la solution exacte). Ce phénomène est donc directement lié au manque de résolution en espace ou à l'étalement de l'onde de choc (ce qui introduit des états intermédiaires non physique).

Pour remédier à ce problème, on peut bien entendu augmenter la résolution spatiale en raffinant le maillage localement. Une alternative est d'utiliser une meilleurs représentation de $\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \omega[v(x, t^n)] dx$ par exemple en suivant 'approche "subcel" de Harten [57]. Une autre idée, très liée au schéma ENO, consiste à décentrer le schéma dans la direction où la solution est régulière, c'est-à-dire remplacer $\Delta x \omega(u_i^n)$ par $\Delta x \omega(\tilde{u}_{i+k}^n)$, \tilde{u}_{i+k}^n étant une valeur extrapolée de la u_i^n . Cette méthode est particulièrement recommandé pour les détonations qui conduisent à des problèmes beaucoup plus raides [95].

10.5.2. Stabilité

L'intégralité d'Equation raide a été motivée depuis déjà de nombreuses années par l'étude des problèmes de cinétique chimique liés principalement aux explosions détonation puis aux problèmes de combustion. L'incorporation de la cinétique chimique dans les problèmes de rentrées atmosphériques conduit a des problèmes comparativement beaucoup moins raides sauf peut être près de l'équilibre chimique. En 1952, Curtis et Hirschfelder [38] s'intéressaient déjà au problème et proposaient une méthode d'intégration traitant les termes sources implicitement pour les équations raides.

L'étude de la stabilité \mathcal{L}^2 par l'analyse de Fourier d'une équation de convection avec terme source $v_t + av_x = \mu v$ (où si le terme source est dû à une réaction endothermique μ

est négatif) montre qu'une discrétisation explicite en temps conduit à une restriction de la forme [40] :

$$a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{1 - \frac{\mu \Delta x}{2a}} \quad (10.96)$$

on voit sur cet exemple que l'introduction d'un terme source diminue le pas en temps nécessaire pour la stabilité ($\mu < 0$ étant une condition nécessaire de stabilité). Pour s'affranchir de cette contrainte, une stratégie efficace consiste à traiter les termes sources implicitement ou de façon plus générale à introduire un précautionneusement des équations de bilan pour ramener les temps caractéristiques de la chimie et de la convection à même échelle [25]. Après simplification, l'étude de la stabilité \mathcal{L}^2 de la discrétisation implicite de $v_t + av_x = \mu v$ (avec $\mu < 0$) conduit d'après [88] à :

$$2 - \Delta t \left(\mu - 2 \frac{a}{\Delta x} \right) \geq 0 \quad (10.97)$$

ce qui est toujours vérifié si $\mu < 0$.

De façon plus générale, une étude de la stabilité de la discrétisation implicite de la loi de conservation scalaire avec terme source (10.91) a été effectuée par Flament et Coquel dans [45]. La discrétisation du terme de convection est écrite sous forme incrémentale dont les coefficients sont supposés vérifier la condition TVD.

Une première approche, où seuls les termes de convection sont linéarisés sous forme conservative, conduit à une stabilité inconditionnelle lorsque $\mu < 0$. En linéarisant aussi le terme source, la stabilité est assurée seulement pour un intervalle de temps fini. Ceci pourrait paraître contradictoire avec la recherche d'une solution stationnaire mais en pratique l'obtention d'une solution dite stationnaire se fait toujours en temps fini. Le traitement implicite des équations avec termes sources permet donc de limiter les problèmes de stabilité.

Chapitre 11

11. Extension à un système hyperbolique non linéaire monodimensionnel

11.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à l'extension à un système hyperbolique non linéaire des algorithmes présentés dans le chapitre précédent dans le cadre d'une équation scalaire hyperbolique. Différentes approches ont été proposées parmi lesquelles nous pouvons distinguer : les méthodes faisant appel à la résolution d'un problème de Riemann exact travaux de Godunov [56], ou Glimm [48], les algorithmes utilisant un solveur du problème de Riemann approché (dont le très populaire solveur de Roe [103] et les méthodes de décomposition de flux (les décompositions de Steger et Warming [125] ou de Van Leer [140] en étant les exemples les plus classiques)

Méthodes basées sur un problème de Riemann exact

La méthode de Godunov a été exposée précédemment pour un équation scalaire. Le principe en reste le même dans le cas d'un système, c'est-à-dire, qu'on résout un problème de Riemann à chaque interface $i+1/2$. On prend ensuite la moyenne de la solution exacte pour obtenir les données constantes par morceaux entre chaque interface afin de continuer le processus. A chaque interface, la solution exacte est composée d'une succession d'états constants séparés par différentes familles d'ondes, chaque famille étant associée à une valeur propre de la matrice Jacobiënne du flux. On trouve par exemple pour les équations d'Euler monodimensionnelles, un faisceau de détente, une onde de choc ou une discontinuité de contact. Les relations vérifiées par la solution à la traversée de chaque type d'ondes permettent de calculer la solution exacte. Néanmoins, en présence d'ondes de chocs, les relations obtenues sont non linéaires et leur résolution ne peut être effectuée que de manière itérative.

Glimm considère aussi une succession de problèmes de Riemann à chaque interface mais les données constantes par morceaux à l'instant suivant sont égales à la valeur exacte de la solution en un point de la maille, choisi de façon aléatoire. Cette méthode a été améliorée par Chorin [29] puis par Collela [30].

Les algorithmes précédents exigent la résolution du problème de Riemann exact, qui ne peut être réalisée que de manière itérative. En outre, on peut remarquer qu'une partie de l'information est perdue dans l'étape de moyenne qui suit.

Méthodes basées sur un problème de Riemann approché

D'autres algorithmes ont alors été proposés pour lesquels la résolution n'est réalisée que de manière approchée. Dans cette classe on peut citer le solveur de Roe très largement utilisé actuellement. Roe [103] a remplacé la résolution du problème de Riemann exact par la résolution exacte d'un problème de Riemann approché :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \bar{A} \frac{\partial U}{\partial x} = 0. \quad (11.1)$$

où $\bar{A} = \bar{A}_{i+\frac{1}{2}}(U_i, U_{i+1})$ est une matrice constante à chaque interface $i + \frac{1}{2}$. Il s'agit là d'un problème plus simple à traiter puisque linéaire. Suivant Roe [103], la matrice \bar{A} doit vérifier un certain nombre de conditions techniques qui sont rappelées ici :

$$F_{i+1} - F_i = A_{i+\frac{1}{2}}(U_{i+1}, U_i) \times (U_{i+1} - U_i)$$

$\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}$ admet un jeu complet de valeurs propres réelles et de vecteurs propres.

$$\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}(U, U) = A(U) \quad (11.2)$$

La première de ces conditions assure que le schéma est conservatif et que, dans le cas où le système se réduit à une équation, on retrouve bien le schéma scalaire. En y ajoutant la deuxième, on obtient une condition nécessaire et suffisante pour calculer la solution exacte si i et $i + 1$ sont de part et d'autre d'une discontinuité. Nous reviendrons dans les sections suivantes sur la détermination de la matrice \bar{A} à partir des conditions précédentes, dans le cas des équations d'Euler.

Méthodes de décomposition de flux

Les méthodes de décomposition de flux, telles celles de Steger et Warming ou Van Leer introduisent une décomposition du flux F en deux contributions $F^-(U)$ et $F^+(U)$ telles que les matrices jacobéennes associées $A^- = \partial F^- / \partial U$ (respectivement $A^+ = \partial F^+ / \partial U$) n'aient que les valeurs propres négatives (respectivement positives).

On obtient ainsi des schémas décentrés qui respectent le sens de propagation de l'information dans le domaine de calcul.

Propriété TVD

Remarquons enfin qu'il n'existe pas d'analogie, pour les systèmes hyperboliques non linéaires, de la propriété de décroissance au cours du temps de la variation de la solution, mise en évidence dans le cas scalaire. La variation totale de la solution peut même augmenter lors de l'interaction entre deux ondes. Du point de vue des algorithmes numériques, l'extension des schémas TVD scalaires au cas de systèmes hyperboliques non linéaires présentée dans ce chapitre, est réalisée en linéarisant localement la matrice jacobéenne du flux. Ainsi la propriété TVD du schéma n'est-elle alors vérifiée que pour le système à coefficients constants obtenu.

Présentation et notation

Nous considérons dans ce chapitre le système différentiel :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0. \quad (11.3)$$

où $U \in R^m$ et $F : R^m \rightarrow R^m$. Introduisons la matrice jacobéenne $A = \partial F / \partial U$. Le système (11.3) étant supposé hyperbolique, la matrice A possède, par définition, un jeu complet de m valeurs propres a^l et m vecteurs propres à droites $R^l, 1 \leq l \leq m$, formant une base de R^m . Il est utile d'introduire également la matrice inversible $R = (R^1, R^2, \dots, R^m)$ dont les colonnes sont constituées par les vecteurs propres R^l . On a alors la relation :

$$R^{-1}AR = \Lambda \quad (11.4)$$

où Λ est la matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont les valeurs propres a^l et où R^{-1} désigne la matrice inverse de R . Nous noterons enfin $W = R^{-1}U$ le vecteur des variables caractéristiques, de composantes w^l .

Ce chapitre est organisé de la manière suivante. Dans une première section, nous présentons l'extension des schémas TVD scalaires au cas où le système (11.3) est à coefficients constants. Dans la section suivantes, nous montrons comment cette extension peut être étendue au cas général, en définissant un système local de directions caractéristiques. Enfin, nous présentons une formulation implicite du schéma obtenu.

11.2. Cas d'un système à coefficients constants

Si la matrice jacobéenne A est constante, on obtient un système d'équations à coefficients constants découplées en multipliant (11.3) par R^{-1} et en utilisant (11.4) :

$$\frac{\partial w^l}{\partial t} + a^l \frac{\partial w^l}{\partial x} = 0, \quad 0 \leq l \leq m. \quad (11.5)$$

Un schéma TVD peut alors être appliqué à chaque équation caractéristique, ce qui conduit à la forme discrétisée suivante :

$$W_i^{n+1} - W_i^n + \lambda \left(H_{i+\frac{1}{2}}^{W^n} - H_{i-\frac{1}{2}}^{W^n} \right) = 0, \quad (11.6)$$

où H^W est le flux numérique qui s'écrit :

$$H_{i+\frac{1}{2}}^W = \frac{1}{2} \left(\Lambda W_{i+1} + \Lambda W_i + \Phi_{i+\frac{1}{2}} \right). \quad (11.7)$$

les composantes ϕ^l du vecteur Φ seront détaillées ultérieurement.

On revient aux variables conservatives en multipliant (11.6) et (11.7) par R , ce qui donne :

$$U_i^{n+1} - U_i^n + \lambda \left(H_{i+\frac{1}{2}}^n - H_{i-\frac{1}{2}}^n \right) = 0, \quad (11.8)$$

et

$$\begin{aligned} H_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left(AU_{i+1} + AU_i + R\Phi_{i+\frac{1}{2}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(F_{i+1} + F_i + R\Phi_{i+\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (11.9)$$

le flux numérique garde ainsi formellement la même écriture que dans le cas scalaire.

La propriété TVD est conservée à condition de définir la variation totale de la fonction U par :

$$TV(U^n) = \sum_{i=1}^m \sum_{i=-\infty}^{+\infty} |w_{i+1}^l - w_i^l| = \sum_{i=1}^m \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \left| \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l \right|. \quad (11.10)$$

les composantes ϕ^l sont données par exemple pour un schéma décentré upwind par $\phi_{i+\frac{1}{2}}^{l^u}$ ou pour un schéma symétrique par $\phi_{i+\frac{1}{2}}^{l^s}$, $1 \leq l \leq m$ (cf. section 10.3.2) :

$$\phi_{i+\frac{1}{2}}^{l^u} = \sigma(a^l) (g_{i+1}^l + g_i^l) - \psi \left(a^l + \gamma_{i+\frac{1}{2}}^l \right) \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l \quad (11.11)$$

$$\phi_{i+\frac{1}{2}}^{l^s} = -\psi(a^l) \left(\alpha_{i+\frac{1}{2}}^l + \tilde{Q}_{i+\frac{1}{2}}^l \right) \quad (11.12)$$

avec

$$\gamma'_{i+\frac{1}{2}} = \sigma(a') \begin{cases} \frac{g'_{i+1} - g'_i}{\alpha'_{i+\frac{1}{2}}} & , \text{ si } \alpha'_{i+\frac{1}{2}} \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (11.13)$$

$$\alpha'_{i+\frac{1}{2}} = w'_{i+1} - w'_i.$$

Les fonctions limiteurs g'_i et $\tilde{Q}'_{i+\frac{1}{2}}$ dépendent maintenant de $\alpha'_{i+\frac{1}{2}}$ (cf. section 10.3.2) :

$$g_i = \min \text{mod} \left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}}, \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (11.14)$$

$$g_i = \frac{\left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} \alpha'_{i-\frac{1}{2}} + \left| \alpha'_{i+\frac{1}{2}} \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right| \right)}{\left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} + \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right)} \quad (11.15)$$

$$g_i = \frac{\left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} \left[\left(\alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 + \delta_2 \right] + \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \left[\left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \delta_2 \right] \right)}{\left(\left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(\alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right)^2 + 2\delta_2 \right)} \quad (11.16)$$

$$g_i = \min \text{mod} \left(2\alpha'_{i-\frac{1}{2}}, 2\alpha'_{i+\frac{1}{2}}, \frac{1}{2} \left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} + \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right) \right) \quad (11.17)$$

$$g_i = S \max \left[0, \min \left(2 \left| \alpha'_{i+\frac{1}{2}} \right|, S \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right), \min \left(\left| \alpha'_{i+\frac{1}{2}} \right|, 2S \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (11.18)$$

où $S = \text{sign} \left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}} \right)$

$$\tilde{Q}'_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}}, \alpha'_{i-\frac{1}{2}} \right) + \min \text{mod} \left(\alpha'_{i+\frac{1}{2}}, \alpha'_{i+\frac{3}{2}} \right) - \alpha'_{i+\frac{1}{2}} \quad (11.19)$$

$$\tilde{Q}'_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(\alpha'_{i-\frac{1}{2}}, \alpha'_{i+\frac{1}{2}}, \alpha'_{i-\frac{3}{2}} \right) \quad (11.20)$$

$$\tilde{Q}'_{i+\frac{1}{2}} = \min \text{mod} \left(2 \alpha'_{i-\frac{1}{2}}, 2 \alpha'_{i+\frac{1}{2}}, 2 \alpha'_{i+\frac{3}{2}}, \frac{1}{2} \left(\alpha'_{i-\frac{1}{2}} - \alpha'_{i+\frac{3}{2}} \right) \right) \quad (11.21)$$

11.3. Cas général : Système local de directions Caractéristiques

Dans le cas général où la matrice A n'est plus constante, l'extension du schéma scalaire au système étudié se fera localement de la même manière que dans le cas du système à coefficients constants. Plus précisément, à chaque interface $i + \frac{1}{2}$, on considère le système localement linéarisé :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \bar{A}_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial U}{\partial x} = 0. \quad (11.22)$$

où la matrice $\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}$ désigne une approximation de la matrice jacobéenne A . De même que dans la section précédente, on écrit (11.22) suivant le système (local) de directions caractéristiques pour obtenir un système d'équations scalaires découplées. Suivant alors la même démarche que celle exposée dans le cas du système à coefficients constants, on obtient pour le flux numérique l'expression suivante :

$$H_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(F_{i+1} + F_i + R_{i+\frac{1}{2}} \Phi_{i+\frac{1}{2}} \right). \quad (11.23)$$

où $R_{i+\frac{1}{2}} = R \left(U_{i+\frac{1}{2}} \right)$ désigne la matrice dont les colonnes sont les vecteurs propres de $\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}$. Les composantes de $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ sont encore données par les formules (11.11) et (11.12)

où l'on remplacera a^l par $a^l_{i+\frac{1}{2}}$, les valeurs propres de la matrice $\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}$.

Plusieurs choix sont possibles pour la détermination de la matrice $\bar{A}_{i+\frac{1}{2}}$. On peut, de façon assez naturelle, la définir à partir de la matrice jacobéenne exacte A , évaluée à un état moyen $\bar{U}_{i+\frac{1}{2}}$, soit $\bar{A}_{i+\frac{1}{2}} = A(\bar{U}_{i+\frac{1}{2}})$. Cet état moyen peut être simplement obtenu en prenant la moyenne arithmétique des états U_i et U_{i+1} . Un choix plus judicieux consiste à utiliser l'état moyen proposé par Roe (cf introduction de ce chapitre et chapitre 12 pour la formulation précise de la moyenne de Roe pour les équations d'Euler).

Remarque

L'approche qui vient d'être décrite ici pour l'extension des schéma TVD scalaires à un système hyperbolique non linéaire permet une grande flexibilité dans la mesure où des limiteurs différents (voir même des schémas scalaires différents) peuvent être utilisés pour les différents champs caractéristiques .

11.4. Formulation implicite

De même que dans le cas scalaire (voir section 10.4), on peut obtenir une formulation totalement implicite, qui s'écrit :

$$U_i^{n+1} - U_i^n + \lambda \left(H_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - H_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = 0, \quad (11.24)$$

En conservant les mêmes notations que celles de la section 10.4.2. En suivant également la même démarche que celle exposé dans le cas scalaire (section 10.4.2) , on peut dériver à partir de l'expression (11.24) la forme linéarisée conservative :

$$E_1 D_{i-1} + E_2 D_i + E_3 D_{i+1} = -\lambda \left(H_{i+\frac{1}{2}}^n - H_{i-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (11.25)$$

où $D_i = U_i^{n+1} - U_i^n$

et avec :

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\lambda}{2} \left[-A_{i-1} - \Omega_{i-\frac{1}{2}} \right]^n \\ E_2 &= I + \frac{\lambda}{2} \left[\Omega_{i+\frac{1}{2}} + \Omega_{i-\frac{1}{2}} \right]^n \\ E_3 &= \frac{\lambda}{2} \left[A_{i+1} - \Omega_{i+\frac{1}{2}} \right]^n \end{aligned} \quad (11.26)$$

Pour des applications stationnaires, une approximation du premier ordre est suffisante dans la partie implicite. Cela conduit à l'expression suivante pour la matrice Ω :

$$\Omega_{i+\frac{1}{2}} = R_{i+\frac{1}{2}}^{-1} \text{diag} \left[\psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \right] R_{i+\frac{1}{2}}^{-1}. \quad (11.27)$$

où $\text{diag} \left[\psi \left(a_{i+\frac{1}{2}} \right) \right]$ est la matrice diagonale dont la diagonale est composée des éléments $\psi \left(a_{i+\frac{1}{2}}^l \right)$.

Remarque

Cette formulation conduit aussi à un système d'équations dont la matrice représentative est tridiagonale par blocs. Ceci reste vérifié même si on conserve une approximation du deuxième ordre pour Ω .

Chapitre 12

12. Equations d'Euler

Il existe différentes approches pour traiter le problème d'un mélange de gaz réactifs ou inertes. Si dans un premier temps, on ne tient pas compte des phénomènes de diffusion, les phénomènes de convection pression sont décrits par les équations d'Euler pour la masse volumique du mélange, la quantité de mouvement et l'énergie totale. L'évolution des espèces, quant à elle, est représentée par les équations de bilan, ou pour un mélange de gaz inertes par une équation de convection pour les masses volumiques partielles, le couplage entre les deux processus se fait par l'équation de conservation de la masse (l'équation pour la masse volumique du mélange est égale à la somme des équations de bilan des espèces) mais aussi par l'intermédiaire de la température qui intervient dans l'équation de conservation de l'énergie et dans le calcul des taux de production chimiques si le mélange est réactif.

Une première méthode pour traiter les mélanges de gaz consiste à découpler le traitement des équations de bilan des espèces de celui des autres équations. Cette approche est dans la pratique justifiée quand on souhaite introduire les phénomènes chimiques dans un code gaz parfait. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie peuvent ainsi être discrétisées suivant un schéma du type indiqué dans le chapitre précédent. La résolution des $(ns - 1)$ équations de bilan pour les espèces est effectuée séparément (par exemple avec un schéma décentré). Cette procédure est facile à mettre en œuvre mais peut entraîner des problèmes de précision. Il suffit de remarquer, par exemple, que les fractions massiques $C_i = \rho_i / \rho$ s'obtiennent comme rapport de deux grandeurs dont les évolutions en temps sont données par deux schémas différents. Ceci peut entraîner des concentrations localement supérieures à l'unité.

Dans une deuxième approche, que nous avons mis en œuvre ici, la méthode numérique traite de manière totalement couplée l'ensemble des équations du problème. Le schéma de discrétisation s'appuie alors par exemple sur une extension des solveurs de Riemann obtenus dans le cas d'un gaz parfait au cas d'un mélange de gaz (voir section : 12.1.1). La résolution à l'aide d'une méthode implicite est alors plus laborieuse car elle nécessite l'inversion d'une matrice de taille $(ns + 3) \times (ns + 3)$ (dans le cas d'écoulement bidimensionnel) au lieu de deux matrices de taille respectives 4×4 et $(ns - 1) \times (ns - 1)$. Les résultats obtenus cependant sont nettement supérieurs pour la

deuxième approche (notamment en ce qui concerne les fractions massiques) [77] et aucune de ces méthodes n'assure toutefois automatiquement la positivité des fractions massiques.

Larrouturou [77] a proposé une troisième procédure, intermédiaire des deux précédentes, qui retient la simplicité de la première approche tout en conservant un certain couplage entre les équations, et qui garantit la positivité des fractions massiques. Les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie sont discrétisées selon un schéma du type Godunov en gelant localement le rapport des chaleurs spécifiques. Puis les $(ns - 1)$ flux des masses volumiques partielles $\rho_i u$ à l'interface $i + \frac{1}{2}$ sont obtenus en écrivant :

$$(\rho_i u)_{i+\frac{1}{2}} = (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} \begin{cases} (C_I^n)_i & \text{si } (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} > 0 \\ (C_I^n)_{i+1} & \text{si } (\rho u)_{i+\frac{1}{2}} < 0 \end{cases} \quad (12.1)$$

Une comparaison des trois méthodes sur le champ complet montre qu'effectivement avec cette troisième approche, les résultats sur les fractions massiques sont précis mais en contre partie les résultats sur la masse volumique, la vitesse et la pression le sont moins (le couplage est moins fort dans cette troisième approche). Larrouturou conclut que le choix entre les deux dernières méthodes citées est délicat. Il conseille cependant la deuxième approche lorsque les variables subissent localement de grandes variations comme lors des ondes de choc fortes intervenant à grand nombre de Mach par exemple.

D'autre part, un couplage fort entre la chimie et les équations de quantité de mouvement et d'énergie est conseillé lorsque les transferts entre les différentes formes d'énergie sont importantes [97]. Par exemple, une faible variation des concentrations peut entraîner un changement non négligeable de l'énergie. De même, une variation de température induit une modification des taux de production de nature exponentielle et influence donc fortement les concentrations. La deuxième approche, entièrement couplée, a par conséquent été retenue dans ce travail.

Signalons enfin que, quelle que soit l'approche retenue, les algorithmes conçus s'appuient en générale sur les méthodes de discrétisation développées dans le cas non réactif (c'est-à-dire sans termes source). Or la présence de termes sources est à l'origine de phénomènes nouveaux (tels par exemple un fort couplage entre les équations caractéristiques), non pris en compte par ces méthodes [106].

Par ailleurs, dans la méthode entièrement couplée qui est envisagée ici, se propose le problème du choix des variables conservatives U . En effet, on peut utiliser soit les ns masses volumiques partielles, soit $(ns - 1)$ masses volumiques partielles plus la masse volumique totale. Ces deux représentations sont strictement équivalentes du point de vue des équations mais elles peuvent conduire à des petites différences numériques. Dans le second cas, on doit déterminer qu'elle est l'espèce qui ne sera pas représentée.

Pour éviter d'accumuler de façon significative les erreurs d'arrondis, il faut choisir une espèce majoritaire. Il est difficile de faire ce choix de façon définitive puisque d'un problème à l'autre les espèces majoritaires peuvent changer ; de même, pour un problème donné, les concentrations évoluent à l'intérieur du domaine. Cette deuxième représentation est en fait souvent choisie par souci de simplicité : elle est en effet plus facile à mettre en place dans un code Euler déjà existant. La première solution semble toutefois préférable et a été adoptée sans équivoque dans ce travail.

Nous nous intéressons dans ce chapitre à l'application des schémas TVD aux équations d'Euler pour un mélange de gaz. Nous considérerons donc, dans un premier temps les équations d'Euler bidimensionnelles pour un mélange de gaz inertes écrites en coordonnées cartésiennes. La discrétisation obtenue sera ensuite étendue aux équations écrites dans un système de coordonnées curvilignes.

12.1 Equations d'Euler en coordonnées cartésiennes

Equations d'Euler

Les équations d'Euler en coordonnées cartésiennes pour un écoulement bidimensionnel s'écrivent dans le cas d'un mélange de gaz inertes sous forme conservative suivantes :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0. \quad (12.2)$$

où U , F et G sont les vecteurs ci-dessous :

$$U = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(E + P) \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho_1 v \\ \rho_2 v \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(E + P) \end{pmatrix}. \quad (12.3)$$

Notons A_x (resp. A_y) la matrice jacobienne de F (resp. G), a_x^l (resp. a_y^l) les valeurs propres de A_x (resp. A_y) , R_x (resp. R_y) la matrice des vecteurs propres à droite de A_x (resp. A_y) et R_x^{-1} (resp. R_y^{-1}) son inverse.

Discrétisation

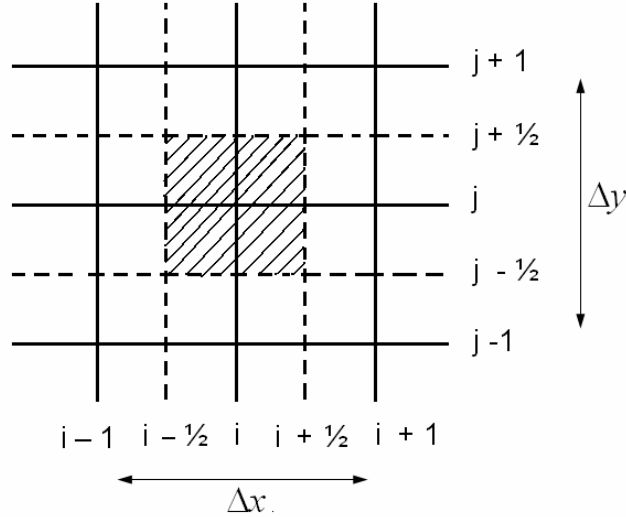


Figure 12.1: Discrétisation en 2D cartésien

La discrétisation du système d'équations bidimensionnel (12.2) sera effectuée ici simplement en traitant de manière séparée chacune des deux directions d'espace. Un schéma TVD monodimensionnel (cf chapitre 11) sera alors appliqué pour la discrétisation de chacun des flux F et G . Il ne s'agit donc pas d'un schéma véritablement bidimensionnel [105], [107] et [128].

Introduisons Δx et Δy les pas en espace tels que $x_i = (i-1)\Delta x$ et $y_i = (i-1)\Delta y$ (voir figure 12.1). On obtient ainsi, en choisissant une forme implicite :

$$U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = 0. \quad (12.4)$$

où les flux numériques $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$ et $\tilde{G}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$ sont définis par les formules suivantes (voir chapitre 11 , section 11.2) :

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{2} \left(F_{i,j} + F_{i+1,j} + R_{x_{i+\frac{1}{2},j}} \Phi_{x_{i+\frac{1}{2},j}} \right) \\ \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left(G_{i,j} + G_{i,j+1} + R_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} \Phi_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} \right) \end{aligned} \quad (12.5)$$

Les composantes ϕ_x^l des vecteurs Φ_x sont alors données pour des schémas TVD décentrés upwind ou symétriques par les identités suivantes :

$$\begin{aligned}\phi_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{lU} &= \sigma \left(a_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \left(g_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l + g_{x_{i,j}}^l \right) - \psi \left(a_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l + \gamma_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \alpha_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \\ \phi_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{lS} &= -\psi \left(a_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \left(\alpha_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l - \tilde{Q}_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right)\end{aligned}\quad (12.6)$$

la fonction $\psi(z)$ est toujours calculée par la formule (10.61), et $\sigma(z)$ a été introduite dans le paragraphe 10.3.1. Les limiteurs $g_{x_{i,j}}^l$ et $\tilde{Q}_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l$ sont donnés par les relations (11.15) à (11.22) avec $\alpha_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l = R_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{-1} (U_{i+1,j} + U_{i,j})$.

Les composantes ϕ_y^l sont obtenues de façon analogue en remplaçant l'indice x par l'indice y , l'interface $(i + 1/2, j)$ par l'interface $(i, j + 1/2)$ et le nœud $(i + 1, j)$ par le nœud $(i, j + 1)$.

Détermination des matrices jacobiennes

Dans le cadre des équations d'Euler pour un mélange de gaz, les expressions des matrices jacobéennes A_x et A_y font intervenir les dérivées de la pression. L'écriture complète de ces dérivées est donnée dans l'annexe E, nous écrirons simplement ici la pression sous la forme d'une fonction des masses volumiques partielles et de l'énergie interne :

$$P = P(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{ns}, \rho e) \quad (12.7)$$

dont la différentielle est donnée par :

$$dP = \sum_{l=1}^{ns} \chi_l d\rho_l + \kappa d(\rho e). \quad (12.8)$$

Les matrices jacobéennes sont détaillées en annexe F.1 A_x (resp. A_y) possède $ns + 3$ valeurs propres : u (resp. v) est valeur propre d'ordre $ns + 1$. Les deux autres étant $u + a_f$ (resp. $v + a_f$) et $u - a_f$ (resp. $v - a_f$), où a_f représente la vitesse du son figée telle que :

$$a_f^2 = \sum_{l=1}^{ns} C_l \chi_l + \kappa h. \quad (12.9)$$

On retrouve, bien entendu, le cas du gaz parfait pour $\chi_I = 0$ et $\kappa = \gamma - 1$, avec γ : le rapport des chaleurs spécifiques à pression et volume constants, ainsi que la formule usuelle $a_f^2 = (\gamma - 1)h$.

La matrice des vecteurs propres à droite associés à ces valeurs propres ainsi que son inverse sont données en annexes G.1.

Enfin, pour définir complètement le schéma, on doit déterminer également la moyenne aux interfaces $(i + 1/2, j)$ et $(i, j + 1/2)$. Nous avons choisi ici la moyenne de Roe généralisée pour un mélange de gaz, qui est présentée dans la section suivante.

12.1.1 Moyenne de Roe pour un mélange de gaz

Pour un gaz parfait

Rappelons que le système de caractéristiques locales conduit dans la direction x par exemple à la détermination d'une matrice \bar{A}_x , moyenne de la matrice jacobéenne A_x à l'interface $i + \frac{1}{2}, j$. En suivant l'approche de Roe [103] on écrit \bar{A}_x sous la forme :

$$\bar{A}_x \left(U_{i+1,j}, U_{i,j} \right) = A_x \left(\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j} \right) \quad (12.10)$$

L'état moyen $\bar{U}_{i+\frac{1}{2},j}$ est tel que la matrice \bar{A}_x vérifie les propriétés (11.2) et en particulier :

$$F_{i+1,j} - F_{i,j} = \bar{A}_x \left(U_{i+1,j} - U_{i,j} \right) \quad (12.11)$$

On obtient de même les grandeurs à l'interface $i, j + \frac{1}{2}$ en remplaçant F et A_x par G et A_y ainsi que $i+1, j$ par $i, j+1$. Introduisons de manière générale les états droit et gauche D et G . Ils représentent aussi bien les nœuds i, j et $i+1, j$ que les nœuds i, j et $i, j+1$. Introduisons aussi la notation $\bar{(\cdot)} = (\cdot)_{i+\frac{1}{2},j}$ ou $(\cdot)_{i,j+\frac{1}{2}}$ pour décrire une valeur moyenne à l'interface entre les états gauche et droit.

Pour un gaz parfait, l'équation (12.11) définit complètement cet état moyen. On trouve [103] :

$$\begin{aligned}\bar{u} &= \frac{u_G + \tilde{D}u_D}{1 + \tilde{D}} & \bar{v} &= \frac{v_G + \tilde{D}v_D}{1 + \tilde{D}} \\ \bar{H} &= \frac{H_G + \tilde{D}H_D}{1 + \tilde{D}} & \tilde{D} &= \sqrt{\frac{\rho_D}{\rho_G}}\end{aligned}\quad (12.12)$$

où H est l'enthalpie totale du mélange. Les valeurs propres de cette matrice moyenne sont $\bar{u}, \bar{u} \pm \bar{a}$ où \bar{a} est donnée par :

$$\bar{a}^2 = (\gamma - 1) \left[\bar{H} - \frac{1}{2} (\bar{u}^2 + \bar{v}^2) \right]. \quad (12.13)$$

Les vecteurs propres à droites \bar{R} de la matrice moyenne sont obtenus simplement par la formule: $\bar{R} = R(\bar{U})$.

Pour un mélange de gaz

L'extension à un mélange de gaz est obtenue en conservant les mêmes formules pour \bar{u}, \bar{v} et \bar{H} . Les ns premières équations de (12.11) conduisent alors :

$$\bar{C}_I = \frac{C_{IG} + \tilde{D}C_{ID}}{1 + \tilde{D}} \quad I = 1, ns. \quad (12.14)$$

Les trois dernières équations sont alors automatiquement vérifiées sous la condition :

$$\sum_{I=1}^{ns} \bar{\chi}_I \Delta \rho_I + \bar{\kappa} \Delta(\rho e) = \Delta P. \quad (12.15)$$

où $\Delta(\cdot) = (\cdot)_D - (\cdot)_G$ représente le saut à travers l'interface. Dans le cas d'un gaz parfait cette équation est identiquement nulle puisque $\chi_I = 0$ et $\kappa = \gamma - 1$ est constant.

L'équation (12.15) ne permet pas de déterminer $\bar{\chi}_l$ et $\bar{\kappa}$ de manière unique. Signalons toutefois que dans le cas particulier où les états gauche et droit sont séparés par une onde de choc et satisfont donc les relations de saut habituelles, les formules (12.12) à (12.15) sont consistantes avec le solveur de Riemann exact (bien que $\bar{\chi}_l$ et $\bar{\kappa}$ ne soient pas unique), [144]. Il existe différentes approches pour déterminer la moyenne de Roe dans le cas d'un mélange, nous allons les décrire succinctement.

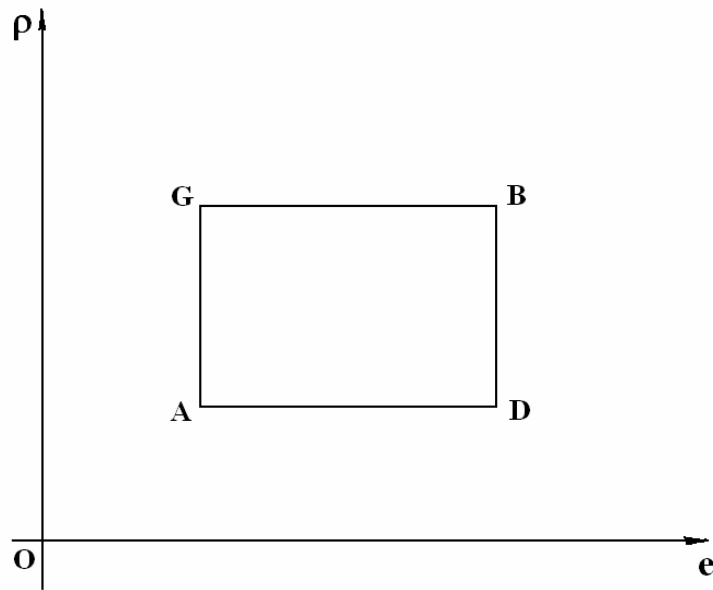


Figure 12. 2: Moyenne à l'interface définie par Glaitser

Approches utilisant un état thermodynamique moyen

Une première approche pour lever l'indétermination sur la moyenne de Roe est d'introduire un état thermodynamique moyen. Pour un gaz à l'équilibre chimique, Grossman et Walters (53) utilisent la moyenne arithmétique de $\gamma = 1 + P/(\rho e)$ et supposent que $\chi = 0$. on retrouve bien la formule de Roe dans le cas d'un gaz parfait mais l'équation (12.15) n'est pas exactement satisfaite pour un gaz à l'équilibre chimique.

Toujours dans le cas d'un gaz à l'équilibre chimique, Glaitser [47] introduit deux états supplémentaires A et B définis sur la figure 12.2 et calcule les dérivées moyennes de la pression suivant la formulation mathématiques suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{\partial P}}{\partial \rho} &= \frac{1}{\Delta \rho} \left[\frac{(P_A + P_D)}{2} - \frac{(P_B + P_G)}{2} \right] & \text{si } \Delta \rho \neq 0 \\
 \frac{\overline{\partial P}}{\partial e} &= \frac{1}{\Delta e} \left[\frac{(P_G + P_A)}{2} - \frac{(P_B + P_D)}{2} \right] & \text{si } \Delta e \neq 0 \\
 \frac{\overline{\partial P}}{\partial \rho} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_D + \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_G \right] & \text{si } \Delta \rho = 0 \\
 \frac{\overline{\partial P}}{\partial e} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_D + \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_G \right] & \text{si } \Delta e = 0
 \end{aligned} \tag{12.16}$$

Cependant, il peut se trouver que les états A et B sortent du domaine de validité de l'équation d'état si les sauts de masse volumique ou d'énergie sont grands (à titre d'exemple à travers une discontinuité de contact), et cela peut entraîner des oscillations dans la solution [84]

Pour un mélange de gaz, Abgrall [1] introduit une température moyenne \bar{T} ; il définit alors $\bar{\chi}_I = \chi_I(\bar{T})$ et $\bar{\kappa} = \kappa(\bar{T})$ en choisissant \bar{T} de telle sorte que la relation (12.15) soit satisfaite. On peut aussi déduire \bar{T} de l'enthalpie moyenne mais l'équation (12.15) ne sera plus alors toujours vérifiée.

Méthode de Montagné et Vinokur

Dans une seconde approche, les dérivées χ et κ sont considérées comme des fonctions implicites des masses volumiques partielles et de l'énergie. En considérant une variation linéaire entre les états G et D en a :

$$\rho_I = (\rho_I)_G + \tau \Delta \rho_I \quad \rho e = (\rho e)_G + \tau \Delta (\rho e) \quad 0 \leq \tau \leq 1 \tag{12.17}$$

Les valeurs moyennes de χ et κ obtenues par intégration le long de ce chemin sont alors :

$$\bar{\chi}_I = \int_0^1 \chi_I[\rho_I(\tau), \rho e(\tau)] d\tau \quad \bar{\kappa} = \int_0^1 \kappa[\rho_I(\tau), \rho e(\tau)] d\tau \tag{12.18}$$

Choisissant $\bar{\chi}_I = \hat{\chi}_I$ et $\bar{\kappa} = \hat{\kappa}$, l'équation (12.15) est exactement vérifiée. Toutefois, l'intégration numérique de (12.18) ne peut être faite exactement et la relation (12.15) n'est alors plus précisément vérifiée. On remédie à cela en projetant les valeurs numériques de $\hat{\chi}_I$ et $\hat{\kappa}$ sur l'hyperplan défini par (12.15).

Montagné et Vinokur , initialement dans le cas d'un gaz à l'équilibre chimique [91],[144] et [145], ont pris la formule trapézoïdale pour calculer $\hat{\chi}_l$ et $\hat{\kappa}$. La même méthode a été choisie ici pour un mélange de gaz réactifs. Les formules obtenues sont assez complexes mais restent définies tant que $\Delta\rho_l, \Delta\rho_e$ ne sont pas tous les deux simultanément nuls. Elles sont données en annexes G.2. La méthode développées par Montagné et Vinokur s'applique en fait de manière très générale à un mélange de gaz parfaits en déséquilibre chimique et thermique , éventuellement ionisé [84].

En fait, n'importe quels états moyens $\hat{\chi}_l$ et $\hat{\kappa}$ peuvent être projetés : l'état moyen donné par $h(\bar{T})$ tout aussi bien que celui proposé par Van Leer [83] : $\hat{\chi}_l = \chi_l(\bar{\rho}_l, \bar{e})$ et $\hat{\kappa} = \kappa(\bar{\rho}_l, \bar{e})$. Mais leur formule n'est plus valable si $\Delta\rho$ ou Δe s'annule.

La moyenne de la vitesse du son \bar{a}_f^{-2} est obtenue par la relation : $\bar{a}_f^{-2} = \sum_{l=1}^{ns} \bar{C}_l \bar{\chi}_l + \bar{\kappa} \bar{h}$. Pour les extensions de la moyenne de Roe décrite dans ce travail, on ne peut pas prouver que $\bar{a}_f^{-2} > 0$ (sauf pour l'extension proposée par Abgrall).

12.1.2 Formulation implicite

Nous indiquons maintenant la procédure utilisée pour la résolution de la forme implicite (12.4) , rappelée ci-dessous :

$$U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = 0. \quad (12.19)$$

On applique ici exactement la même procédure que dans le cas monodimensionnel. Introduisons de même $D = U^{n+1} - U^n$, un développement de Taylor du flux numérique conduit à :

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} &= \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n + \frac{1}{2} \left[A_{x_{i,j}}^n D_{i,j} + A_{x_{i+1,j}}^n D_{i+1,j} - \Omega_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^n (D_{i+1,j} - D_{i,j}) \right] \\ \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} &= \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \frac{1}{2} \left[A_{y_{i,j}}^n D_{i,j} + A_{y_{i,j+1}}^n D_{i,j+1} - \Omega_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^n (D_{i,j+1} - D_{i,j}) \right] \end{aligned} \quad (12.20)$$

où l'on retient uniquement une précision du premier ordre pour les opérateurs implicites ci-dessous :

$$\begin{aligned}\Omega_{x_{i+\frac{1}{2},j}} &= R_{x_{i+\frac{1}{2},j}} \operatorname{diag} \left[\psi \left(a_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \right] R_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{-1} \\ \Omega_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} &= R_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} \operatorname{diag} \left[\psi \left(a_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^l \right) \right] R_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^{-1}\end{aligned}\quad (12.21)$$

L'introduction de (12.20) dans (12.19) conduit à la forme matricielle suivante :

$$\begin{aligned}A^W D_{i-1,j} + A^S D_{i,j-1} + A^P D_{i,j} + A^N D_{i,j+1} + A^E D_{i,j+1} \\ = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right)\end{aligned}\quad (12.22)$$

Il s'agit d'un système d'équation dont la matrice représentative est penta diagonale par blocs de taille $(ns + 3) \times (ns + 3)$.

Les matrices A^W, A^S, A^P, A^N et A^E de dimension $(ns + 3) \times (ns + 3)$ sont données ci après :

$$\begin{aligned}A^W &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(A_{x_{i-1,j}}^n + \Omega_{x_{i-\frac{1}{2},j}}^n \right) \\ A^S &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(A_{y_{i,j-1}}^n + \Omega_{y_{i,j-\frac{1}{2}}}^n \right) \\ A^P &= I + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\Omega_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^n + \Omega_{x_{i-\frac{1}{2},j}}^n \right) + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(\Omega_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^n + \Omega_{y_{i,j-\frac{1}{2}}}^n \right) \\ A^N &= \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta y} \left(A_{y_{i,j+1}}^n - \Omega_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^n \right) \\ A^E &= \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(A_{x_{i+1,j}}^n - \Omega_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^n \right)\end{aligned}\quad (12.23)$$

12.1.3. Conservation des proportions locales d'atomes

Pour un fluide réactif non visqueux, régi par les équations d'Euler avec termes sources, la discrétisation des termes convectifs fait appel aux schémas développés précédemment. Les termes sources, quant à eux sont simplement approchés par leur valeur au centre du volume de contrôle.

Par ailleurs, pour un mélange réactif, par conservation de la masse des éléments atomiques, les termes sources vérifient, pour l'air composé de cinq espèces ($N_2, O_2, NO, NetO$) par exemple:

$$\begin{aligned} 2\frac{\omega_{N_2}}{M_{N_2}} + \frac{\omega_N}{M_N} + \frac{\omega_{NO}}{M_{NO}} &= 0 \\ 2\frac{\omega_{O_2}}{M_{O_2}} + \frac{\omega_O}{M_O} + \frac{\omega_{NO}}{M_{NO}} &= 0 \end{aligned} \quad (12.24)$$

Les identités formulées ci-dessus peuvent être écrite sous la forme générale :

$$\sum_{I=1}^{ns} \beta_I \omega_I = 0 \quad (12.25)$$

Réécrivons d'autre part les équations de bilan des espèces (2.4) en négligeant les termes visqueux et en introduisant les fractions massiques :

$$\frac{\partial C_I}{\partial t} + u \frac{\partial C_I}{\partial x} + v \frac{\partial C_I}{\partial y} = \frac{\omega_I}{\rho} \quad (12.26)$$

En appliquant l'équation d'identité (12.25) aux équations (12.26), on obtient :

$$\frac{D}{Dt} \left(\sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I = 0 \right) \quad (12.27)$$

où D est un opérateur de dérivation correspondant à $D \cdot = \frac{\partial \cdot}{\partial t} + (\overrightarrow{\text{grad}} \cdot) \vec{V}$. La quantité $\sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I$ est donc constante sur une trajectoire. Si de plus, initialement, le gradient $\overrightarrow{\text{grad}} \left(\sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I \right)$ est nul dans tout le domaine, alors la quantité $\sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I$ se conserve à chaque instant et en tout point.

Pour les cas d'applications envisagés, l'air est initialement au repos et non dissocié ; le gradient $\overrightarrow{\text{grad}} \left(\sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I \right)$ est donc nul. La propriété de conservation des proportions atomiques est donc satisfaite sur chaque volume de contrôle et doit donc être respectée par la méthode de discrétisation. Cette vérification, dans le cas d'une discrétisation suivant un schéma TVD d'ordre un, fait l'objet de l'annexe F.4.

12.2 Equation d'Euler en coordonnées curvilignes

Nous considérons maintenant les équations d'Euler écrites en coordonnées curvilignes. L'application des schémas TVD aux systèmes hyperboliques de lois de conservation écrits en coordonnées curvilignes, telle qu'elle a été proposée par Yee [158], est décrite ci-après.

12.2.1 Equations

La forme conservative des équations d'Euler en coordonnées curvilignes $\xi(x,y)$, $\eta(x,y)$ quelconques pour un mélange de gaz inertes est rappelée ci-dessous :

$$\frac{\partial(U/J)}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{F}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{G}}{\partial \eta} = 0. \quad (12.28)$$

Nous avons conservé les mêmes notations que la section 7.3, les flux convectifs s'écrivant dans ce cas échéant :

$$\tilde{F} = \frac{(\xi_x F + \xi_y G)}{J} \quad \tilde{G} = \frac{(\eta_x F + \eta_y G)}{J}$$

Notons $\Delta \xi$ et $\Delta \eta$ les pas en espace tels que : $\xi_i = i \Delta \xi$ et $\eta_j = j \Delta \eta$, la discrétisation implicite de l'équation (12.28) s'écrit :

$$\frac{1}{j} (U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left(\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = 0 \quad (12.29)$$

où les flux numériques $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$ et $\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}$ sont maintenant associés à \tilde{F} et \tilde{G} . Leur écriture est la suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (F_{i,j} + F_{i+1,j}) + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (G_{i,j} + G_{i+1,j}) + R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} \Phi_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} \right] \\ \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} (F_{i,j} + F_{i,j+1}) + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} (G_{i,j} + G_{i,j+1}) + R_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} \Phi_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} \right] \end{aligned} \quad (12.30)$$

où R_ξ (resp. R_η) représente la matrice des vecteurs propres à droite de la matrice jacobéenne \hat{A}_ξ (resp. \hat{A}_η) de \hat{F} (resp. \hat{G}) par rapport à $\hat{U} = U/J$. Les expressions de \hat{U} et \hat{A} sont détaillées dans la section suivante. Les termes de métrique (exemple $(\xi_x/J)_{i+\frac{1}{2}}$ intervenant dans l'équation (12.30) sont évalués à l'aide des relations (7.10) (tel que $\xi_x/J = y_\eta$). On est ainsi assuré de la préservation d'un écoulement uniforme.

Notons a_ξ^l les valeurs propres de \hat{A}_ξ . Les composantes de Φ_ξ sont données pour un schéma TVD décentré upwind ou symétrique par les relations :

$$\begin{aligned} \phi_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{lU} &= \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} \left(\sigma \left(a_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \left(g_{\xi_{i+1,j}}^l + g_{\xi_{i,j}}^l \right) - \psi \left(a_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l + \gamma_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \\ \phi_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{lS} &= \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} \left[\psi \left(a_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \left(\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l - \hat{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \right] \end{aligned} \quad (12.31)$$

où les limiteurs $g_{\xi_{i,j}}^l$ et $\hat{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l$ ont la même écriture formelle que $g_{x_{i,j}}^l$ et $\hat{Q}_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^l$ (relations (11.15) à (11.22)) en prenant $\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l = R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{-1} (U_{i+1,j} - U_{i,j})$. L'écriture de a_ξ^l est donnée dans la section suivante. Le flux $\hat{G}_{i,j+\frac{1}{2}}$ est déterminé de manière analogue.

12.2.2. Valeurs propres et vecteurs propres

Afin de se ramener aux matrices jacobienne A_x et A_y des flux F et G en coordonnées cartésiennes, que l'on peut déterminer aisément, on introduit la rotation d'angle θ transformant le système de coordonnées (x,y) en (ξ,η') où η' est orthogonale à ξ .

Définissant la matrice de rotation T_ξ et les vecteurs \hat{U}, \hat{F} par :

$$T_\xi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{U} = T_\xi U = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} \\ \rho\hat{u} \\ \rho\hat{v} \\ E \end{pmatrix} \quad F = \frac{J}{|\text{grad}\xi|} T_\xi \hat{F} = \begin{pmatrix} \rho_1\hat{u} \\ \rho_2\hat{u} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns}\hat{u} \\ \rho\hat{u}^2 + P \\ \rho\hat{u}\hat{v} \\ \hat{u}(E + P) \end{pmatrix}$$

où :

$$\cos\theta = \xi_x / |\text{grad}\xi|, \sin\theta = \xi_y / |\text{grad}\xi|, \text{grad}\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2},$$

$$\hat{u} = u \cos\theta + v \sin\theta, \hat{v} = -u \sin\theta + v \cos\theta.$$

Ici θ représente l'angle entre les axes x et ξ .

La matrice jacobienne $\hat{A} = \partial \hat{F} / \partial \hat{U}$ a alors exactement la même expression que la matrice $A_x = \partial F / \partial U$, où l'on remplace u et v par \hat{u} et \hat{v} . De même, les vecteurs propres R_x et a'_x mais maintenant fonction de \hat{u} et \hat{v} . Enfin, \hat{A}_ξ et \hat{A} sont liées par la relation :

$$\hat{A}_\xi = |\text{grad} \xi| T_\xi^{-1} \hat{A} T_\xi$$

D'où finalement :

$$R_\xi = T_\xi^{-1} \hat{R} \quad \text{et} \quad a'_\xi = |\text{grad} \xi| \hat{a}'_\xi \quad (12.32)$$

le développement ci-dessus est relatif au flux \hat{F} dans la direction ξ . En ce qui concerne le flux \hat{G} dans la direction η , la même méthode sera employée en remplaçant simplement la définition de $\cos \theta$ et de $\sin \theta$ par $\cos \theta = \eta_x / |\text{grad} \eta|$, $\sin \theta = \eta_y / |\text{grad} \eta|$ avec $\text{grad} \eta = \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}$.

12.2.3. Formulation implicite

La linéarisation de la forme implicite (12.29) est similaire à celle obtenue dans le cas cartésien et conduit à la forme matricielle suivante :

$$\begin{aligned} & A^W D_{i-1,j} + A^S D_{i,j-1} + A^P D_{i,j} + A^N D_{i,j+1} + A^E D_{i+1,j} \\ &= -\frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left(\tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \end{aligned} \quad (12.33)$$

Les expressions des matrices A^W, A^S, A^P, A^N et A^E de dimension $(ns + 3) \times (ns + 3)$ sont données en annexe F.3.

Chapitre 13

13. Résolution des équations de Navier - Stokes avec termes sources

Nous donnons dans ce chapitre la discrétisation qui sera utilisée pour les équations de Navier- Stokes dans l'approximation de couche mince pour un mélange réactif. Rappelons que le système d'équations s'écrit (cf. Formule 7.12) :

$$\frac{1}{J} \frac{\partial(y^a U)}{\partial t} + \frac{\partial(y^a \hat{F})}{\partial \xi} + \frac{\partial(y^a \hat{G})}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \mathcal{P} = \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial(y^a S_{v_1})}{\partial \eta} + \frac{a}{J} \frac{1}{\text{Re}} S_{v_3} + \frac{y^a}{J} S \quad (13.1)$$

où $a = 0$ pour des écoulements bidimensionnels plans et $a = 1$ pour les écoulements axisymétriques. Un traitement totalement implicite et complètement couplé a été choisi ici : la procédure de résolution prend donc en compte toutes les équations simultanément et implicitement (voir introduction chapitre 12). La procédure entièrement couplée est de plus préférable pour des applications en fluide visqueux où les problèmes de convergence sont plus marqués. Il a été observé en effet [161] qu'un couplage fort entre les équations permettait une convergence plus rapide vers la solution stationnaire, tandis qu'avec un couplage plus faible la convergence est parfois impossible sur les maillages fins. Le traitement totalement implicite permet de s'affranchir des limitations sur le pas en temps imposées par la présence de nombreux temps caractéristiques dans les équations (échelles caractéristiques de la convection, de la diffusion et des phénomènes chimiques), [157].

Comme cela a été indiqué dans l'introduction de cette partie, la discrétisation de (13.1) est obtenue en traitant séparément les contributions non visqueuses, visqueuses et les termes sources. La forme discrétisée complète s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 & \frac{y_{i,j}^a}{J_{i,j}} (U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n) \\
 + & \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(y_{i+\frac{1}{2},j}^a \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - y_{i-\frac{1}{2},j}^a \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) + \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \\
 + & a \frac{\Delta t}{J_{i,j}} \mathcal{P}_{i,j}^{n+1} \\
 = & \frac{1}{\text{Re}} \frac{\Delta t}{\Delta \eta^2} \left\{ \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left(DV_1^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_1^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right) \right] \right. \\
 & \left. - \left[y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \left(DV_1^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) - DV_1^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right) \right] \right\} \\
 + & \frac{a}{2 \text{Re}} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left\{ \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left(DV_2^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_2^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right) \right] \right. \\
 & \left. - \left[y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \left(DV_2^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) - DV_2^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right) \right] \right\} \\
 + & \frac{a}{2 J_{i,j}} \frac{1}{\text{Re}} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \mu_{i,j} \left[DV_3^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_3^{n+1} \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right] \\
 + & \frac{\Delta t y_{i,j}^a}{J_{i,j}} \mathcal{S}_{i,j}^{n+1}
 \end{aligned} \tag{13.2}$$

Où l'expression de chacun des termes apparaissant dans (13.2) est détaillée dans les sections suivantes.

Nous rappelons dans ce contexte la forme des flux numériques non visqueux \tilde{F} et \tilde{G} (voir chapitre 12). Ensuite, nous indiquons la discrétisation utilisée pour les termes de diffusion, correspondant aux contributions DV_1, DV_2 et DV_3 dans l'équation (13.2), puis celles retenue pour les termes sources. Nous présentons enfin la forme implicite linéarisée déduite de (13.2) et la procédure adoptée pour la résolution du système linéaire résultant.

13.1 Discrétisation des équations

13.1.1 Termes de convection

Les termes convectifs sont discrétisés selon le schéma symétrique de Yee – Roe – Davis présenté dans le chapitre 12. Pour faciliter la lecture de ce chapitre, nous rappelons les expressions des flux numériques \tilde{F} et \tilde{G} :

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (F_{i,j} + F_{i+1,j}) + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (G_{i,j} + G_{i+1,j}) + R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} \Phi_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} \right] \\ \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} (F_{i,j} + F_{i,j+1}) + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} (G_{i,j} + G_{i,j+1}) + R_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} \Phi_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} \right]\end{aligned}\quad (13.3)$$

Les matrices R_{ξ} et R_{η} sont données au paragraphe 12.2.2 et l'obtention de la moyenne de Roe aux interfaces est décrite dans la section 12.1.1. Les composants de Φ sont :

$$\phi_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{ls} = \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} \left[\psi \left(a_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \left(\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l - \hat{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \right] \quad (13.4)$$

Avec $\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l = R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{-1} (U_{i+1,j} - U_{i,j})$. La fonction limiteur $\hat{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l$ est déterminée par l'une des formules suivantes :

$$\begin{aligned}\tilde{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l &= \min \text{mod} \left(\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l, \alpha_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^l \right) + \min \text{mod} \left(\alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l, \alpha_{\xi_{i+\frac{3}{2},j}}^l \right) \\ &\quad - \alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l\end{aligned}\quad (13.5)$$

$$\tilde{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l = \min \text{mod} \left(\alpha_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^l, \alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l, \alpha_{\xi_{i+\frac{3}{2},j}}^l \right) \quad (13.6)$$

$$\tilde{Q}_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l = \min \text{mod} \left(2 \alpha_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^l, 2 \alpha_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l, 2 \alpha_{\xi_{i+\frac{3}{2},j}}^l, \frac{1}{2} \left(\alpha_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^l - \alpha_{\xi_{i+\frac{3}{2},j}}^l \right) \right) \quad (13.7)$$

Sauf indication contraire, le limiteur utilisé pour les calculs est le deuxième (formule (13.6)). La fonction $\psi(z)$ est rappelée ci-dessous :

$$\psi(z) = \begin{cases} |x| & |x| \geq \delta, \\ \frac{z^2 + \delta^2}{2\delta}, & |x| < \delta. \end{cases} \quad (13.8)$$

Enfin, la fonction min mod est définie par :

$$\min \text{ mod}(x_1, \dots, x_k) = \text{sign}(x_1) \max(0, \min(|x_1|, x_2 \text{sign}(x_1), \dots, x_k \text{sign}(x_1))).$$

L'étude menée par Montagné and al. [90] a montré que, pour des problèmes d'ordre hypersoniques, la convergence pouvait être affectée entre autres par les deux points suivants :

- Le choix des vecteurs propres à droite : les variables caractéristiques sur lesquelles sont appliquées les limiteurs dépendent en effet de ce choix et jouent un rôle important pour la stabilité de la méthode lorsqu'on augmente le nombre de mach. certaines variables, telles que la pression, subissent, à travers l'onde de choc, des variations plus importantes que d'autres comme la masse volumique ou l'énergie totale. l'étude [90] montre aussi qu'il est préférable d'appliquer les limiteurs sur des variables caractéristiques ayant la dimension d'une pression (voir annexe F.1).
- Le paramètre δ : il est conseillé de le relier à une combinaison de la vitesse du son et des composantes de la vitesse de l'écoulement. Et précisément, en coordonnées curvilignes compte tenu de la relation (12.32) ; la valeur de ce paramètre pour le calcul du flux numérique dans la direction ξ est donnée par :

$$\delta_\xi = \delta_1 |\text{grad} \xi|_{i+\frac{1}{2},j} \left[a_{f_{i+\frac{1}{2},j}} + \left| \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} \right| + \left| \tilde{v}_{i+\frac{1}{2},j} \right| \right] \quad (13.9)$$

Où l'on rappelle que :

$$\cos \theta = \xi_x / |\text{grad} \xi|, \sin \theta = \xi_y / |\text{grad} \xi|, \text{grad} \xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2},$$

$$\hat{u} = u \cos \theta + v \sin \theta, \hat{v} = -u \sin \theta + v \cos \theta.$$

Toutes les variables sont déterminées aux interfaces par la moyenne de Roe . Une expression analogue est utilisée pour la valeur δ_η intervenant dans le calcul du flux numérique dans la direction η .

Pour des applications non visqueuses, il est usuel de fixer δ_1 à une valeur constante généralement variant entre 0.1 et 0.25 [46] . Cependant, pour des écoulements hypersoniques visqueux, ce choix peut conduire à des résultats peu précis dans la couche limite, la dissipation numérique pouvant s'avérer trop importante par rapport à la dissipation physique. Afin de limiter les effets de la dissipation numérique dans la zones visqueuse (couche limite) nous avons opter pour la procédure exposé par A. Lafon [74] et qui consiste à utiliser des valeurs

variables du paramètre δ_1 dans le domaine de calcul. Pour des applications sur des corps émoussés, au voisinage de l'onde de choc forte détachée, ce qui correspond environ à cinq points du maillage autour de l'onde, δ_1 est fixé à des valeurs assez élevées comprises selon le cas test entre 0.4 et 0.7. Sur tous les autres points du maillage on choisit une faible valeur de δ_1 [10^{-4}]. En effet, selon Lafon [74] le flux de chaleur pariétal n'est plus affecté par la valeur du flux numérique dès que ce dernier est inférieur à $\delta_{1\min} = 10^{-3}$.

13.1.2 Termes de diffusion

La discrétisation des termes de diffusion se fait selon un schéma centré. En effet, dans le cas limite où le nombre de Reynolds tend vers zéro, les termes visqueux sont dominants dans l'équation et celle-ci devient de nature parabolique. A l'interface $(i, j + \frac{1}{2})$, le terme S_{V_1} est égale à la somme de deux combinaisons :

$$S_{V_1, j + \frac{1}{2}} = \mu_{i, j + \frac{1}{2}} \frac{1}{\Delta\eta} \left[DV_1 \left(\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}, U_{i, j + 1} \right) - DV_1 \left(\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}, U_{i, j} \right) \right] + \frac{1}{2} a \mu_{i, j + \frac{1}{2}} \left[DV_2 \left(\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}, U_{i, j + 1} \right) - DV_2 \left(\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}, U_{i, j} \right) \right] \quad (13.10)$$

Où l'on a fait figurer explicitement la dépendance par rapport aux termes métriques notés de façon générique $\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}$. De même le vecteur S_{V_3} est discrétisé au nœud (i, j) sous la forme :

$$S_{V_3, i, j} = \mu_{i, j} \frac{1}{2\Delta\eta} \left[DV_3 \left(\mathcal{N}_{i, j + \frac{1}{2}}, U_{i, j + 1} \right) - DV_3 \left(\mathcal{N}_{i, j - \frac{1}{2}}, U_{i, j - 1} \right) \right] \quad (13.11)$$

Les composantes des vecteurs DV_1 , DV_2 et DV_3 sont données dans l'annexe G.1.

13.1.3 Termes sources

L'approximation numérique du vecteur des termes sources S représentant les taux de production chimiques des espèces est obtenue en évaluant simplement ceux-ci au nœud (i, j) .

Enfin le terme source supplémentaire $\mathcal{P}_{i, j}$ apparaissant en axisymétrie est également évalué au nœud (i, j) , soit :

$$\mathcal{P}_{i, j} = (0 \quad \dots \quad 0 \quad -P_{i, j} \quad 0)^T \quad (13.12)$$

13.1.4 Conditions aux limites

Domaine de calcul

Le domaine de calcul que nous avons envisagé est limité dans la direction ξ par la frontières $i = 1$ et $i = N_\xi$ (où N_ξ est le nombre total de points dans la direction ξ) et dans la direction η , par les frontières $j = 1$ et $j = N_\eta$ (où N_η est le nombre total de points dans la direction η , voir figure 13.1

Conditions en $i = 1$

Pour les écoulements axisymétriques, les équations deviennent singulières sur l'axe de symétrie. On a choisi donc de prendre les lignes d'indice $i = 1$ et $i = 2$ de part et d'autre de l'axe de symétrie et symétrique par rapport à celui (figure 13.1-(a)). La discrétisation en un point d'indice $i = 2$ fait intervenir des points d'indice $i = 0$ qui sont simplement reliés par symétrie au point d'indice $i = 3$.

Pour les écoulements symétriques plans la ligne d'indice $i = 1$ correspond à l'axe de symétrie.

Enfin pour des configurations non symétriques, la ligne $i = 1$ correspond à une condition de sortie. L'écoulement est essentiellement supersonique, sauf dans une mince couche près de la paroi. On extrapole les variables suivant : $U_{i=1} = U_{i=2}$.

Conditions en $i = N_\xi$

L'écoulement est essentiellement supersonique, sauf dans une mince couche près de la paroi ; encore une fois on extrapole les variables suivant : $U_{i=N_\xi} = U_{i=N_\xi-1}$

Conditions à la paroi : $j = 1$

Nous avons déjà discuté des conditions à la paroi dans le chapitre 6, nous les rappelons brièvement ici, En $j = 1$, on prend :

$$u = 0, \quad v = 0, \quad T = T_{paroi}, \quad \frac{\partial P}{\partial \eta} = 0. \quad (13.13)$$

et pour les espèces ($I = 1, ns$) :

$$C_I = (C_I)_{eq} \quad \text{paroi catalytique}$$

$$\frac{\partial C_I}{\partial \eta} = 0. \quad \text{paroi non catalytique}$$

Note :

- l'indice eq : indique les grandeurs à l'équilibre chimique
- le critère de non Catalycité est écrit conformément à la loi de Fick pour le flux de diffusion massique

Conditions en $j = N_\eta$

Cette frontière est choisie suffisamment loin de la paroi pour que l'onde de choc détachée soit entièrement contenue dans le domaine de calcul. On est contraint d'imposer sur cette frontière les conditions d'entrée pour un écoulement supersonique soit : $U_{j=N_\eta} = U^\infty$ où les composantes de U^∞ seront déterminées à partir des données à l'infini amont.

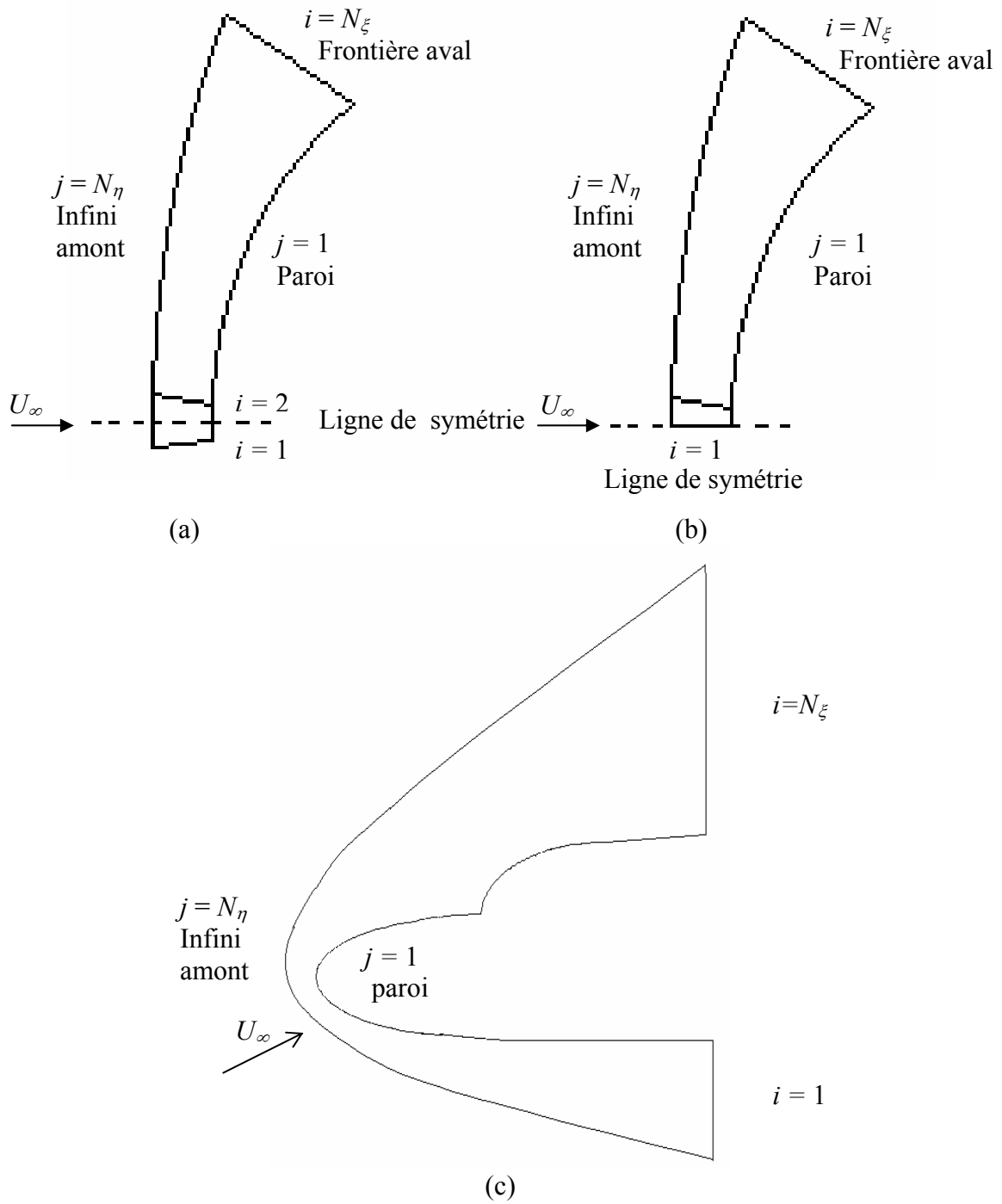


Figure 13. 1: Frontières du domaine de calcul, configurations : axisymétrique (a), plane symétrique (b) et plane non symétrique (c)

13.1.5. Système discrétisé final

Une forme implicite linéarisée est ensuite obtenue à partir du système implicite non linéarisé (13.2). L'approche conservative présentée dans la section 12.2.3 est utilisée pour les termes convectifs. Pour les autres contributions, la linéarisation est effectuée en écrivant un développement de Taylor. Ce qui conduit au système :

$$A^W D_{i-1,j} + A^S D_{i,j-1} + A^P D_{i,j} + A^N D_{i,j+1} + A^E D_{i+1,j} = R_{i,j}^n \quad (13.15)$$

Où D est égal à $U^{n+1} - U^n$, l'expression des matrices A^W, A^S, A^P, A^N, A^E sont de dimension $(ns + 3) \times (ns + 3)$ est donnée en annexe G.3 ; elle contiennent maintenant les contributions d'origine visqueuse et chimique. Le vecteur $R_{i,j}^n$, résidu de l'équation à l'instant n , représente l'écart de la solution U^n par rapport à la solution stationnaire recherchée. Son expression figure également dans l'annexe G.3. Une représentation matricielle simplifiée du système (13.15) est donnée sur la figure 13.2.

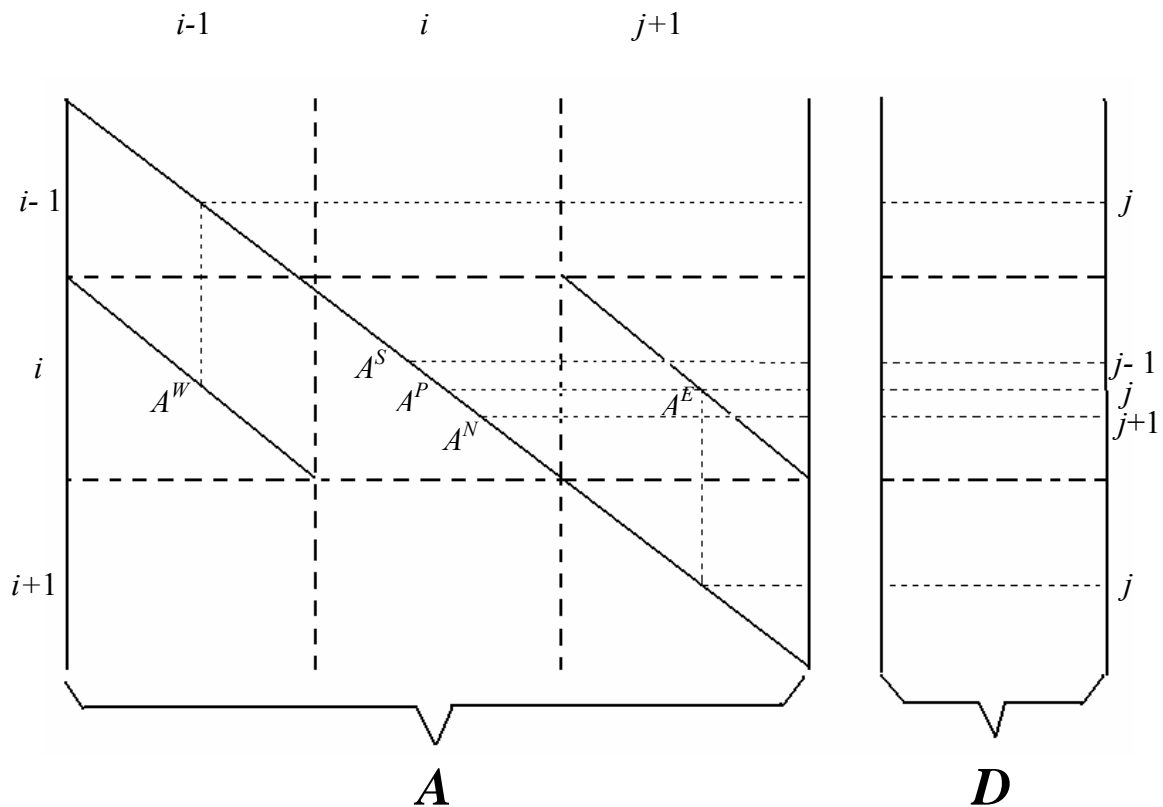


Figure 13.2: Représentation simplifiée du système final

13.2. Résolution du système final

Rappelons que le système formé des équations de Navier – Stokes instationnaires dans l’approximation de couche mince (13.1) a été discrétisé de façon implicite en temps (équation (13.2)) puis linéarisé (formule (13.15)). A partir d’une solution initiale, la recherche de la solution stationnaire du problème s’effectue à l’aide d’une marche en temps, de pas Δt , et nécessite la résolution du système linéaire (13.15) à, chaque pas de temps. Nous exposons la procédure approchée utilisée pour cette inversion dans la section suivante. Nous donnons ensuite le mode de calcul du pas de temps ainsi que des conditions initiales.

13.2.1. Procédure de relaxation

Pour résoudre le système (13.15), différentes méthodes sont envisageables. On peut par exemple factoriser de façon approchée cet opérateur bidimensionnel au moyen de deux opérateurs monodimensionnels. Une autre option, qui a été retenue dans ce travail, est d’employer une méthode de relaxation par lignes dans la direction ξ . Cette dernière approche s’avère supérieure dans le cas d’équations linéaires scalaires multidimensionnelles ($v_i + av_x + bv_y = 0$) par exemple [27]. On peut montrer que dans ce cas, un schéma non factorisé converge vers la solution stationnaire en un pas de temps tandis qu’un schéma factorisé peut ne pas converger du tout. En fait, le pas de temps optimum pour les approches factorisées est proche de la condition CFL = 1, ce qui est très pénalisant [27]. On observera par ailleurs que les termes de diffusion sont, de cette manière, traités de façon implicite.

Réécrivons donc le système (13.15) sous la forme :

$$A^S D_{i,j-1} + A^P D_{i,j} + A^N D_{i,j+1} = R_{i,j}^n - A^W D_{i-1,j} - A^E D_{i+1,j}$$

Ou sous forme matricielle :

$$\mathcal{A}_i^n \mathcal{D}_i = \mathcal{R}_i^n - \mathcal{B}_i^n \mathcal{D}_{i-1,j} - \mathcal{C}_i^n \mathcal{D}_{i+1,j} \quad (13.16)$$

Où \mathcal{D}_i est le vecteur de composantes $D_{i,j}$, avec $1 \leq j \leq N_\eta$, \mathcal{A}_i^n une matrice tri diagonale par blocs de taille N_η , chaque bloc étant de dimension $ns + 3 \times ns + 3$ (et dont les diagonales sont formées des blocs A^S, A^P, A^N) et \mathcal{R}_i^n (resp. \mathcal{C}_i^n) es une matrice diagonale par blocs de taille N_η , chaque bloc étant de dimension $ns + 3 \times ns + 3$ et dont la diagonale est formée des blocs A^W (resp. A^E) (voir figure 13.2).

La méthode de relaxation adoptée fait intervenir une succession de balayages aller et retour du domaine de calcul qui permettent la propagation rapide de l’information dans les deux sens. Ils permettent ainsi d’accélérer la convergence dans la poche subsonique

autour du point d'arrêt. Ils s'imposent aussi naturellement dans le cas de configurations non symétriques où l'on doit calculer l'écoulement à l'intrados et à l'extrados. Lors des balayages aller (dans le sens des i croissants), on résout le système suivant :

$$\mathcal{A}_i^n \mathcal{D}_i = \mathcal{R}_i^n - \mathcal{B}_i^n \mathcal{D}_{i-1,j} \quad i = 2, \dots, N_\xi$$

Et pour les balayages retour (dans le sens des i décroissants)

$$\mathcal{A}_i^n \mathcal{D}_i = \mathcal{R}_i^n - \mathcal{C}_i^n \mathcal{D}_{i+1,j} \quad i = N_\xi - 1, \dots, 2.$$

L'équation (13.16) n'est plus exactement vérifiée mais, à convergence $\mathcal{D}_i = 0$ et on retrouve bien $\mathcal{R}_i = 0$.

13.1.5. Calcul du pas de temps

Un pas de temps uniforme dans tout le domaine, prescrit par une condition CFL , a été utilisé. En effet, la solution transitoire calculée respecte plus ou moins l'évolution des processus physiques. Cet aspect est important pour un écoulement du type réactif où on trouve un couplage très fort entre la pression, la température et les fractions massiques et où le développement de solutions intermédiaires non physiques en cours de résolution peut empêcher la convergence tel que tel que des fractions massiques négatives.

Plus précisément, une valeur du nombre de CFL est imposée et le pas en temps est calculé selon la formule :

$$\Delta t_{i,j} = \left\{ \frac{CFL}{\max \left[\left| \text{grad}_\xi \right|_{i,j} (c_{i,j} + V_{\xi,j}) \right], \left| \text{grad}_\eta \right|_{i,j} (c_{i,j} + V_{\eta,j}) \right]} \right\} \quad (13.17)$$

Où V_ξ (resp. V_η) est le module de la vitesse dans la direction ξ (resp. η).

13.1.6. Initialisation de la solution

Pour initier la solution, nous avons pris les conditions suivantes, identiques sur chaque ligne i égale constante :

- $C_I = C_{I_\infty} \quad I = 1, ns \quad j = 1, N_\xi$
- u varie linéairement de $u = 0$ en $j = 1$ à $u = \cos \alpha U_\infty$ en $j = N_\eta$
- v varie linéairement de $v = 0$ en $j = 1$ à $u = \sin \alpha U_\infty$ en $j = N_\eta$
- T varie linéairement de $T = T_p$ en $j = 1$ à $T = T_\infty$ en $j = N_\eta$
- $P = P_\infty \quad j = 1, N_\eta$

Où α représente l'angle d'incidence.

Part III

Résultats et Interprétations

Chapitre 14

14. Introduction

Nous abordons maintenant la présentation de tous les résultats obtenus. Dans le chapitre 15 nous étudions l'influence du choix du schéma TVD (décentré upwind ou symétrique) et des fonctions limiteurs intervenant dans la construction de ces schémas qui ont été discutés dans le chapitre 10, pour la simulation d'écoulements d'un mélange de gaz inertes ou réactifs. Cette étude est effectuée sur le cas classique du tube à choc, modélisé par les équations d'Euler pour les écoulements monodimensionnels instationnaires. Elle permet une comparaison des différents schémas, en particulier du point de vue de leur précision pour le traitement d'un mélange de gaz inertes ou réactifs.

Les trois chapitres suivants sont consacrés au cas d'écoulements visqueux réactifs sur des géométries bidimensionnelles (plan ou axisymétrique).

Dans le chapitre 16, les résultats obtenus pour une série de cas tests de validation sont examinés. Pour chaque configuration choisie, une analyse de l'écoulement est indiquée et une comparaison des résultats avec d'éventuels résultats expérimentaux ou numériques est effectuée.

- La première configuration est un écoulement à $M_\infty = 25$ sur une double ellipse. Ce cas test a été exposé à Antibes [151] (Hypersonic flows workshop), ce qui autorise une confrontation de six jeux de résultats.
- La deuxième géométrie est une sphère, pour laquelle nous avons considéré deux jeux de résultats qui diffèrent par leurs conditions infinies amont : $M_\infty = 15.3$ et $M_\infty = 12.7$. des résultats expérimentaux et numériques permettent d'approfondir la validation.
- Enfin, nous étudions les phénomènes de relaxation chimique pour un écoulement réactif sur une plaque plane. Cette configuration simple permet de plus une comparaison avec des résultats issus d'une simulation numérique de couche limite [42].

Puis, dans le chapitre 17, relatif à l'étude d'écoulements autour d'un hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$ et $M_\infty = 9.15$, nous examinons l'influence de la modélisation retenue auparavant (représentation thermodynamique, données par le calcul des vitesses de réactions chimiques, modélisation des coefficients de diffusion) sur la solution obtenue. Nous présentons également une comparaison avec des résultats numériques obtenus avec un code de couche limite au deuxième ordre [111].

Enfin, dans le dernier chapitre (chap. 18) nous indiquons quelques éléments pouvant expressément affecter la convergence de la méthode adoptée vers la solution stationnaire recherchée. En particulier, la procédure utilisée pour la détermination du pas d'avancement de la solution est décrite et à titre d'illustration des résultats typiques de convergence pour des écoulements à $M_\infty = 9.15$ et $M_\infty = 25.5$ sur un hyperboloïde sont présentés.

Chapitre 15

15. Application des schémas TVD : Etude du tube à choc

Pour étudier l'influence du choix du schéma et des limiteurs pour la simulation d'écoulements réactifs nous avons appliqué une discrétisation TVD aux équations d'Euler instationnaires pour un écoulement réactif monodimensionnel. Nous présentons en premier lieu, la procédure numérique employée qui diffère légèrement de la procédure générale donnée au chapitre 13. Nous étudions ensuite le cas d'un tube à choc contenant deux gaz inertes différents avant de présenter des résultats pour un tube à choc contenant un mélange de gaz réactifs.

15.1. Procédure numérique

La procédure numérique utilisée dans cette étude diffère très légèrement de celle déjà décrite au chapitre 13, car nous nous intéressons précisément au calcul d'une solution instationnaire pour laquelle nous avons choisi une discrétisation explicite précise au deuxième ordre en espace et en temps pour les termes convectifs. Pour s'affranchir de la raideur due aux termes sources, ces derniers sont discrétisés implicitement. On obtient par conséquent une équation de la forme :

$$U_i^{n+1} - U_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) = \Delta t S_i^{n+1} \quad (15.1)$$

Où U et F sont donnés par la formule (12.3) dans laquelle on prend $v = 0$ et on supprime la $ns+2$ ème composante et où S représente le vecteur des termes sources. L'expression du flux numérique $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n$ est identique à la formule (12.5) (en ne tenant pas

Compte de l'indice j) mais le vecteur $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ est modifié pour obtenir le second ordre en espace et en temps. Pour un schéma décentré upwind, les composantes de $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ sont données par la formule (12.6) avec la section (10.3.1) :

$$\sigma(z) = \frac{1}{2} \left(\psi(z) - \frac{\Delta t}{\Delta x} z^2 \right) \quad (15.2)$$

Et pour un schéma symétrique les composantes de $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ sont

$$\phi_{xi+\frac{1}{2},j}^l = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(a_{xi+\frac{1}{2},j}^l \right)^2 \tilde{Q}_{xi+\frac{1}{2},j}^l - \psi \left(a_{xi+\frac{1}{2},j}^l \right) \left(\alpha_{xi+\frac{1}{2},j}^l - \tilde{Q}_{xi+\frac{1}{2},j}^l \right) \quad (15.3)$$

Pour des applications instationnaires, le paramètre entropique δ_1 intervenant dans la fonction ψ (section 10.2.2) peut être pris égal à zéro :

$$\psi(z) = \begin{cases} |x| & |x| \geq \delta, \\ \frac{z^2 + \delta^2}{2\delta}, & |x| < \delta. \end{cases} \quad (15.4)$$

Le système non linéaire est résolu en employant la méthode courante de Newton – Raphson :

$${}_m \underline{\lim}_{\infty} q^m = U^{n+1} \quad (15.5)$$

et on linéarise le terme source autour de q^m :

$$S_i^{m+1} = S_i^m + \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_i^m (q_i^{m+1} - q_i^m) \quad (15.6)$$

On obtient ainsi, à partir de (15.1) la discrétisation suivante :

$$\left(I - \Delta t \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_i^m \right) (q_i^{m+1} - q_i^m) = - \left[(q_i^m - U_i^m) + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^m - \tilde{F}_{i-\frac{1}{2}}^m \right) \right] + \Delta t S_i^m \quad (15.7)$$

La résolution de (15.7) implique l'inversion d'une matrice de dimension $ns \times ns$ puisque les deux dernières lignes de la matrice $\partial S/\partial U$ sont égales à zéro. On peut encore réduire la taille du système en prenant en considération la propriété de conservation des éléments atomiques [100].

15.1.1. Mélange de gaz non réactifs

Considérons tout d'abord le cas d'un tube à choc contenant deux gaz idéaux inertes dont les coefficients isentropiques sont respectivement $\gamma_1=1.4$ et $\gamma_2=1.2$; les conditions initiales sont décrites dans le tableau 15.1, où l'indice G (resp. D) désigne l'état du gaz dans la partie gauche (driver) (resp. droite (driven)) du tube à choc. La longueur du tube est fixée à 1 m et une discrétisation spatiale, à pas constant, en 120 intervalles est utilisée.

Tableau 15. 1 : Conditions de calcul (mélange gaz inerte)

ρ_{1G}	ρ_{1D}	ρ_{2G}	ρ_{2D}	P_G	P_D	u_G	u_D
1.0	0.0	0.0	0.125	1.0	0.1	0.0	0.0

A partir de l'instant initial, trois ondes apparaissent dans le tube à choc, séparant des zones d'écoulement uniforme : une détente, suivie d'une discontinuité dite de contact et d'une onde de choc. Le profil de masse volumique par exemple met en évidence ces trois ondes, voir figure 15.1. La pression et la vitesse restent constantes à travers la discontinuité de contact tandis que la composition du mélange ne varie pas à travers la détente et l'onde de choc, voir figure 15.1.

La solution exacte du problème a été calculée à l'aide de la méthode des caractéristiques. Sur toutes les figures, elle est représentée en trait discontinu tandis que la solution numérique proposée dans cette recherche est indiquée par des points.

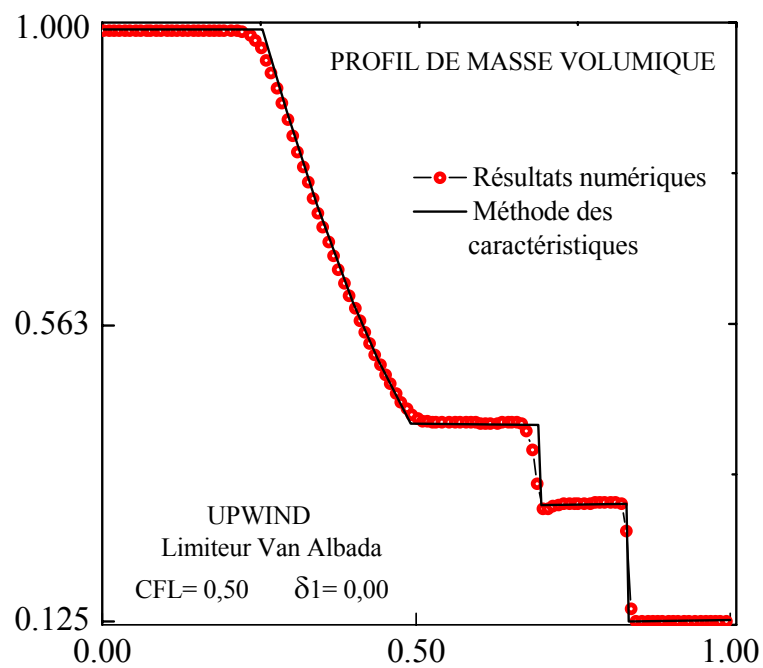
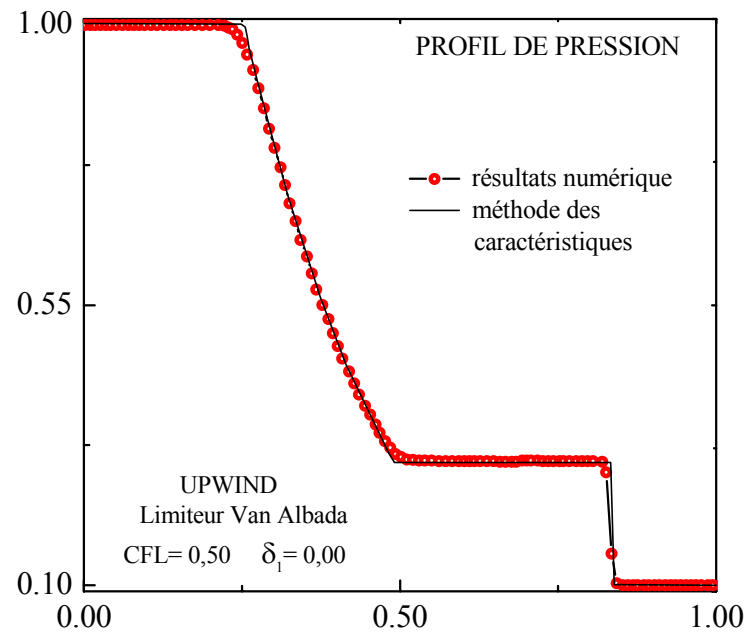


Figure 15. 1: Tube à choc : mélange de gaz inertes

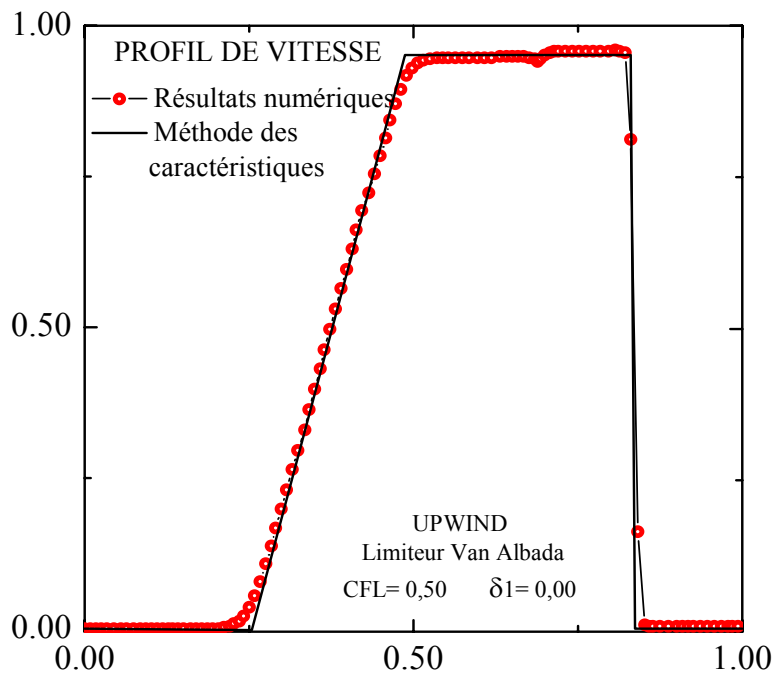
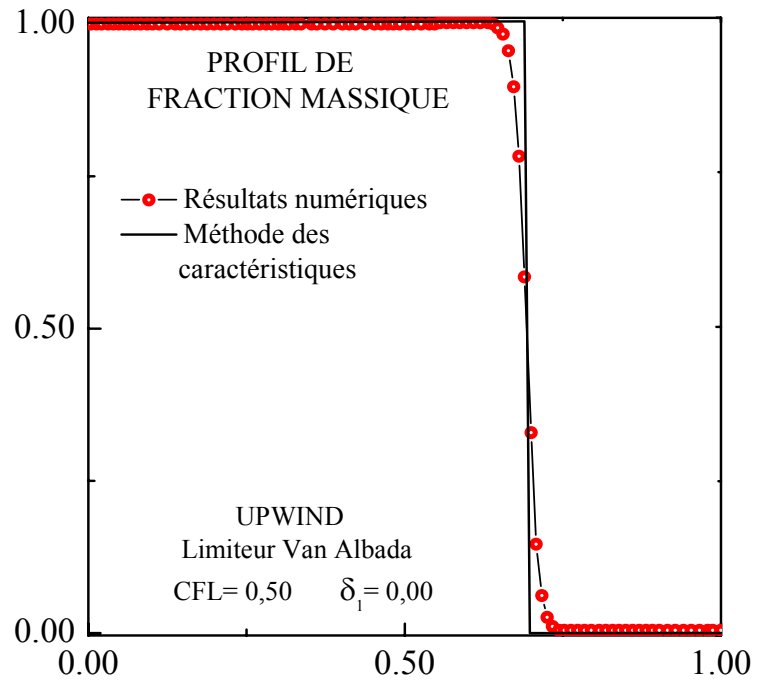


Figure 15.1 : Tube à choc : mélange de gaz inertes (suite)

Etude des différents schémas

Sur les figures 15.2 et 15.3 sont représentés les profils de masse volumique obtenus avec le schéma symétrique associé aux trois limiteurs [(11.19), (11.20) et (11.21)]. De même, les résultats obtenus avec le schéma décentré upwind et les cinq limiteurs [(11.14) à (11.18)] sont donnés sur les figures 15.4 à 15.6.

Globalement, le schéma symétrique apparaît plus diffusif que le schéma décentré upwind. Il permet une capture de l'onde de choc en deux points tandis que la capture de l'onde de choc est légèrement plus précise avec le schéma décentré upwind. L'influence de choix du limiteur se fait plus marquante sur la capture de l'onde de choc. Elle apparaît plus nettement sur la détente où l'utilisation du schéma décentré upwind associé au limiteur superbe (formule 11.18) donne les meilleurs résultats. Toutefois, pour les deux types de schémas (décentré upwind ou symétrique) et quelque soit le limiteur choisi, des oscillations apparaissent au voisinage de la discontinuité de contact. Elles sont plus intenses si on utilise les limiteurs les plus compressifs, en particulier le limiteur superbe qui donne pourtant d'excellents résultats en gaz parfait pour ce type de discontinuité [161].

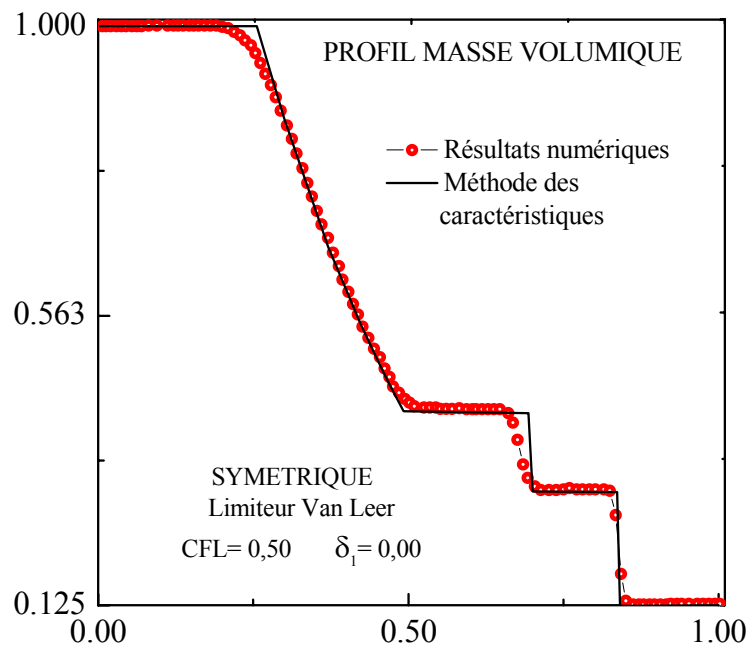
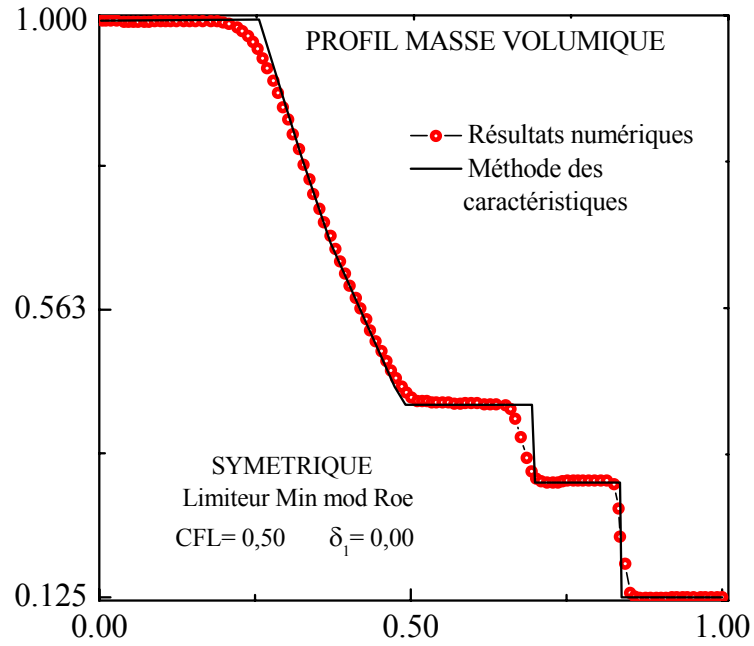


Figure 15.2 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma symétrique et limiteurs (11.19) et (11.20).

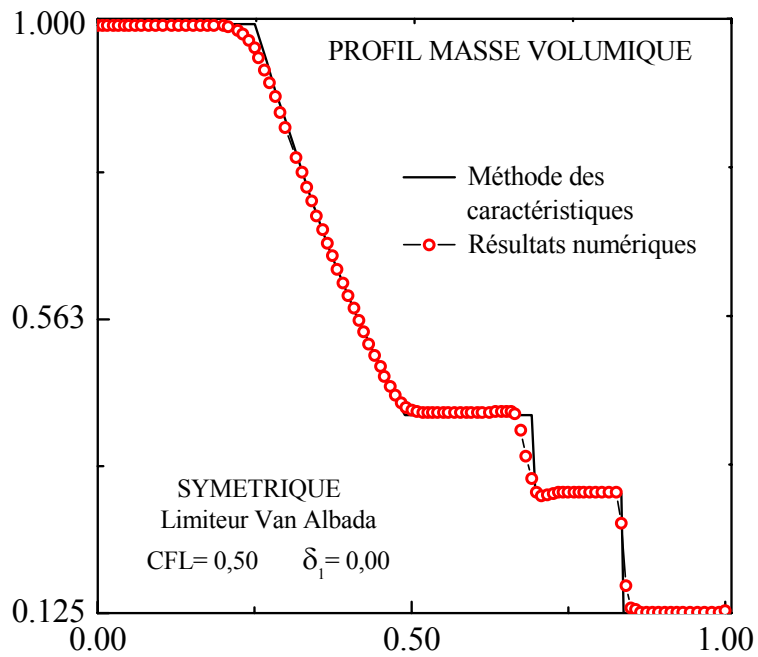


Figure 15. 3: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma symétrique et limiteur (11.21).

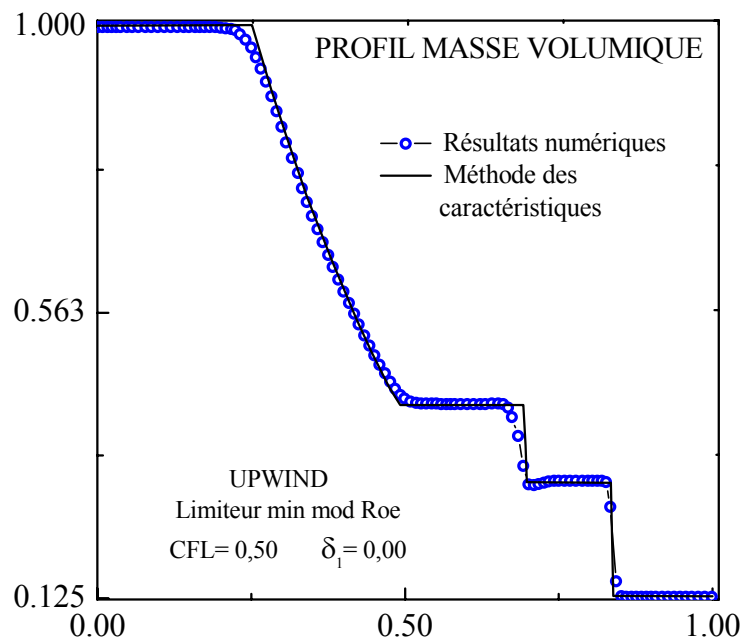


Figure 15. 4: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.14).

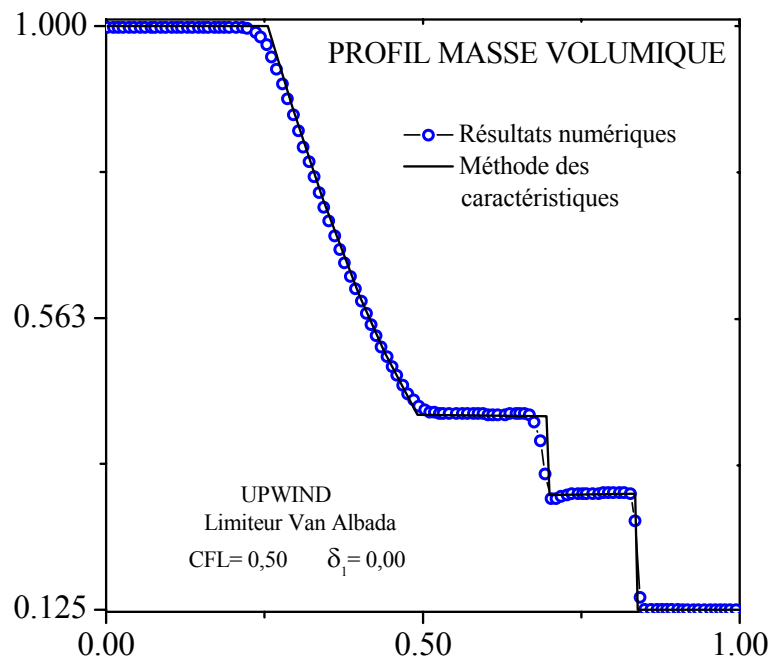
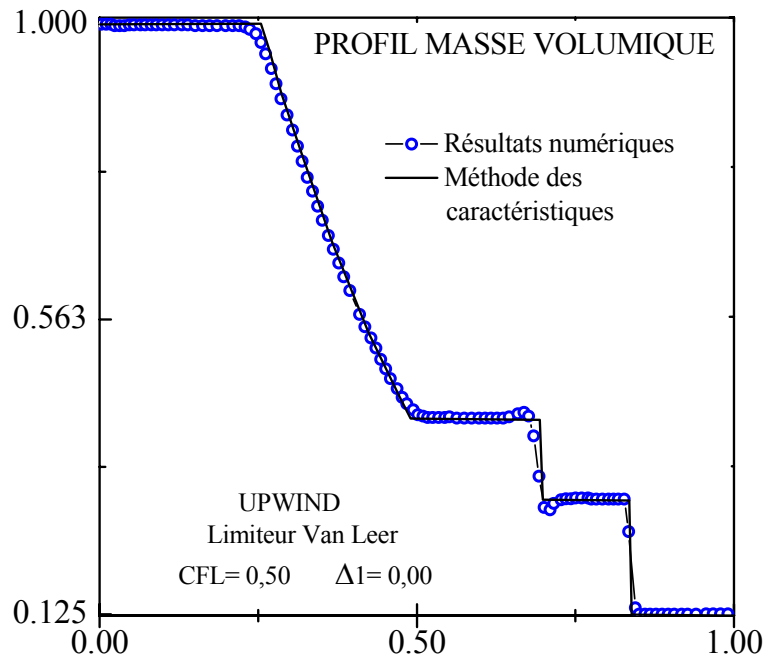


Figure 15. 5 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.15) et (11.16).

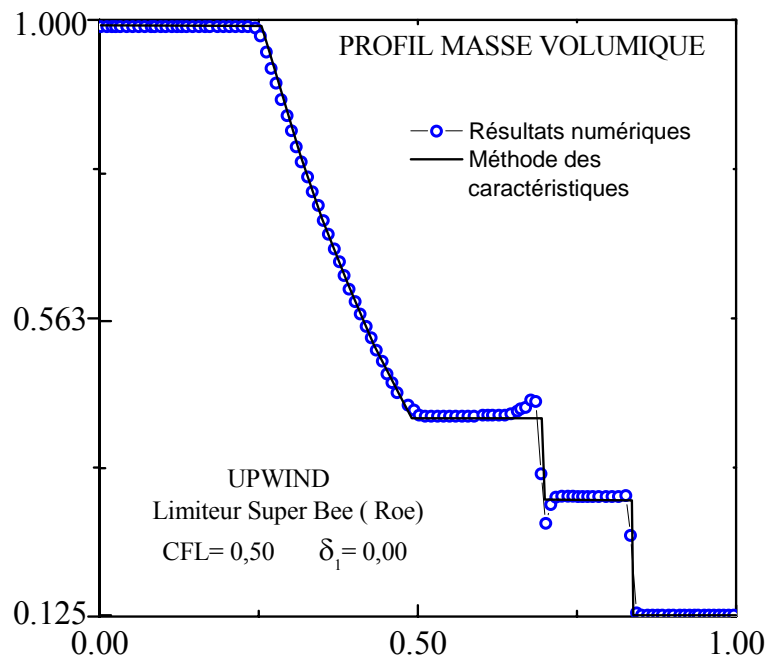
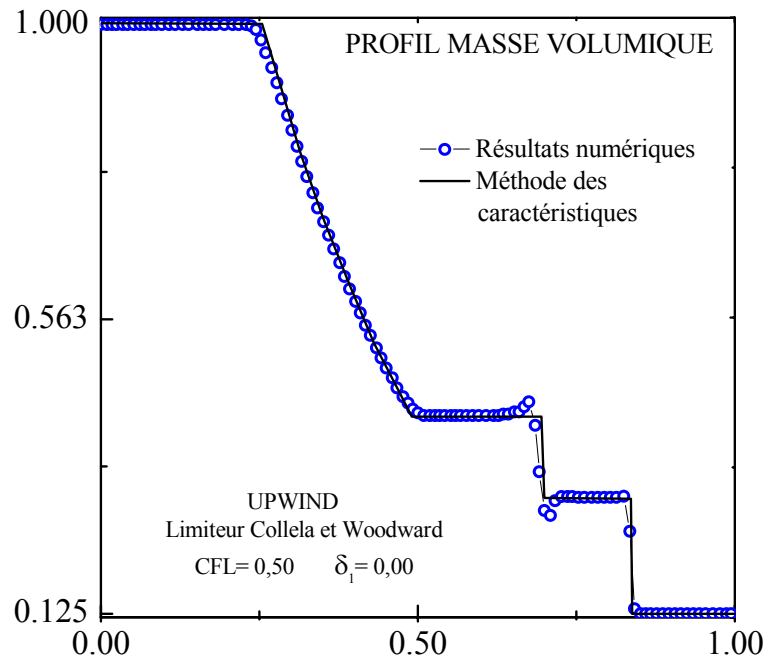


Figure 15.6: Tube à choc (mélange de gaz inertes) : schéma décentré upwind et limiteurs (11.17) et (11.18).

Etude d'une discontinuité de contact

Rappelons tout d'abord l'expression du flux numérique pour un schéma du premier ordre dans lequel le paramètre de correction entropique δ est nul (en rapport avec le schéma de Harten dans le cas scalaire, section 10.2.1) :

$$\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(F_i + F_{i+1} - \left| A_{i+\frac{1}{2}} \right| \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right) \right)$$

Où l'état moyen à l'interface $i + 1/2$ est défini par :

$$\Delta F = A_{i+\frac{1}{2}} \Delta U.$$

Supposons maintenant qu'à l'instant initial t_0 les états i et $i+1$ soient séparés par une discontinuité de contact avec les données suivantes :

$$U_i^{t_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_G \\ \rho_G u \\ E_G \end{pmatrix} \quad U_{i+1}^{t_0} = \begin{pmatrix} \rho_D \\ 0 \\ \rho_D v \\ E_D \end{pmatrix}$$

Avec $u_G = u_D = u$ et $P_G = P_D = P$ à travers la discontinuité de contact.

Supposons de plus que la vitesse de propagation de la discontinuité soit supersonique, ce qui implique que le schéma est décentré amont. On obtient alors pour le flux numérique :

$$\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}} = F_i$$

A l'instant suivant t_1 , les variables aux points i et $i+1$ s'écrivent :

$$U_i^{t_1} = U_i^{t_0} - \lambda(F_i - F_{i-1}) = U_i^{t_0}$$

$$U_{i+1}^{t_1} = U_{i+1}^{t_0} - \lambda(F_{i+1} - F_i).$$

soit :

$$U_{i+1}^{t_1} = \begin{pmatrix} (1 - \lambda u) \rho_D \\ \lambda u \rho_G \\ (\rho_D - \lambda u (\rho_D - \rho_G)) u \\ (1 - \lambda u) E_D + \lambda u E_G \end{pmatrix}$$

La densité et la vitesse au temps t_1 au point d'indice $i+1$ sont donc données par :

$$\begin{aligned}\rho_{i+1}^{t_1} &= \rho_D - \lambda u (\rho_D - \rho_G) \\ u_{i+1}^{t_1} &= u\end{aligned}$$

Et on retrouve bien l'inégalité des vitesses de part et d'autre de la discontinuité de contact. La pression peut se déduire de l'expression de l'énergie totale : pour un mélange de deux gaz inertes dont les coefficients isentropiques γ_1 et γ_2 , sont constants. On peut écrire :

$$P = (\gamma - 1)\rho e \quad \text{avec} \quad \gamma = \frac{\rho_1 C_{P1} + \rho_2 C_{P2}}{\rho_1 C_{V1} + \rho_2 C_{V2}}$$

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}(\rho e)_{i+1}^{t_1} &= P \left(\frac{1 - \lambda u}{\gamma_1 - 1} + \frac{\lambda u}{\gamma_2 - 1} \right) \\ P_{i+1}^{t_1} &= P (\gamma_{i+1}^{t_1} - 1) \left(\frac{1 - \lambda u}{\gamma_1 - 1} + \frac{\lambda u}{\gamma_2 - 1} \right)\end{aligned}$$

On voit ainsi que pour un mélange de gaz pour lesquels $\gamma_1 \neq \gamma_2$, la pression à l'instant t_1 sera différente de la pression P qui régnait de part et d'autre de la discontinuité de contact.

15.1.2. Mélange de gaz réactifs

On considère maintenant le cas où le tube à choc (figure 15.7) est rempli d'air, composé de cinq espèces (N_2, O_2, N, O, NO) pouvant réagir chimiquement. Le modèle de Park (dix sept réactions) a été retenu pour le calcul des vitesses de réaction chimique. Les conditions initiales ont été reprises de [90] et [130]. A l'origine l'air est en équilibre chimique dans les deux compartiments (driver et driven) du tube à choc et sa composition est calculée à l'aide du modèle de Park. Les conditions initiales sont détaillées dans le tableau 15.2.

Tableau 15. 2 : Conditions de calcul pour le tube à choc : mélange de gaz réactifs

	P	T	e	ρ_{N2}	ρ_{O2}	ρ_N	ρ_O	ρ_{NO}
	N.m ⁻²	°K	m ² s ⁻²	Kg.m ⁻³	Kg.m ⁻³	Kg.m ⁻³	Kg.m ⁻³	Kg.m ⁻³
D	1.19 10 ⁴	1378	1.10 10 ⁶	2.30 10 ⁻²	6.94 10 ⁻³	0.00	2.09 10 ⁻⁸	3.38 10 ⁻⁵
G	9.92 10 ⁴	4390	7.34 10 ⁶	4.94 10 ⁻²	6.71 10 ⁻⁴	2.34 10 ⁻⁴	1.34 10 ⁻²	2.22 10 ⁻³

La longueur du tube est de 1 m et le maillage comporte 101 points. Tous les calculs présentés dans cette section ont été obtenus avec une valeur CFL égale à 0.21.

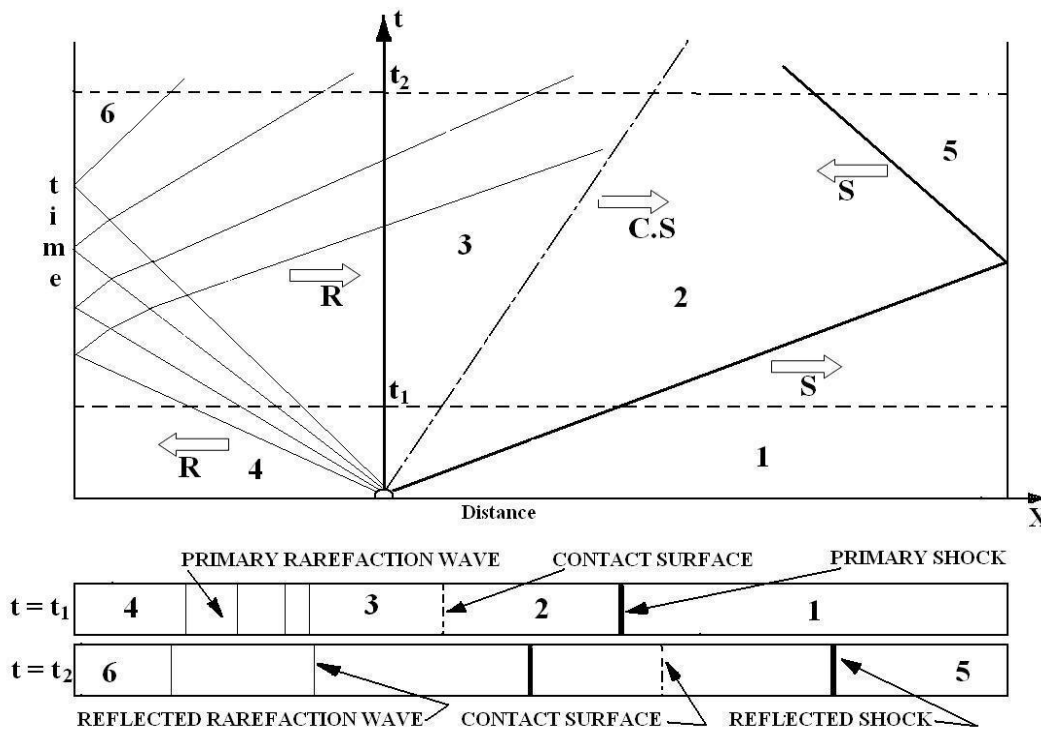


Figure 15. 7 : Tube à choc : Zones d'écoulements et localisation des perturbations
S: onde de choc, C.S: Surface de contact, R : ondes de Riemann

Les figures 15.8 et 5.9 représentent les profils de masse volumique, température, vitesse et fraction massique obtenus avec le schéma symétrique et les limiteurs (11.20) et (11.21). Les mêmes profils obtenus cette fois ci avec le schéma décentré upwind et les limiteurs (11.16) et (11.18) sont tracés sur les figures 15.10 et 15.11

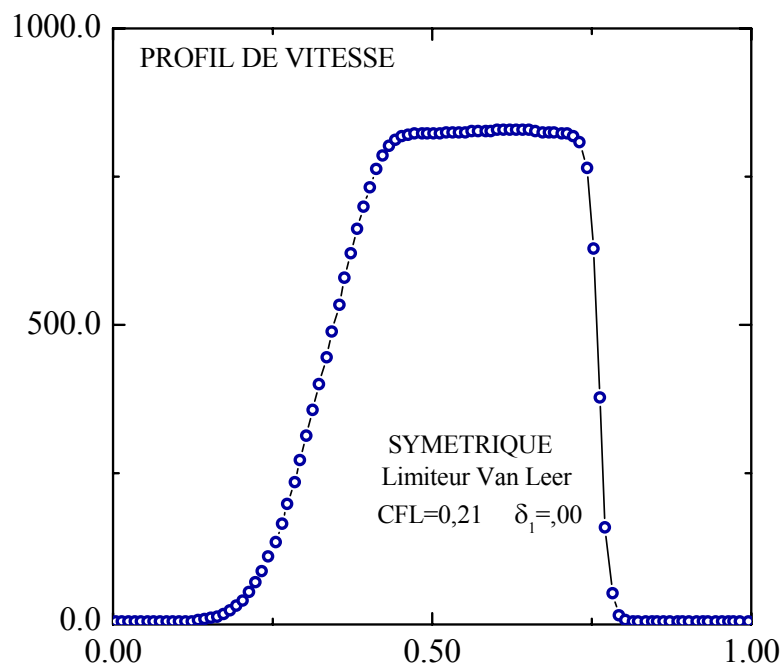
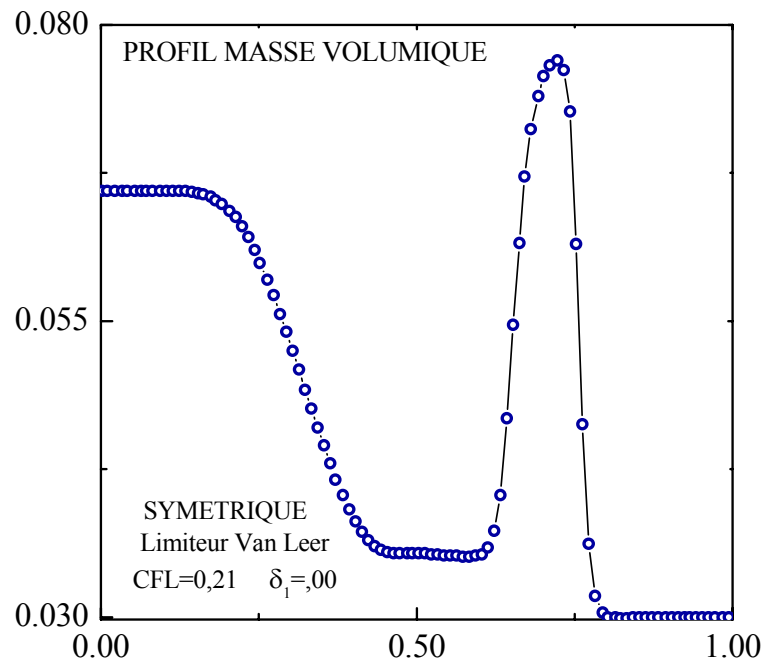


Figure 15. 8 : Tube à choc (mélange de gaz inertes) schéma symétrique et limiteur (11.20).

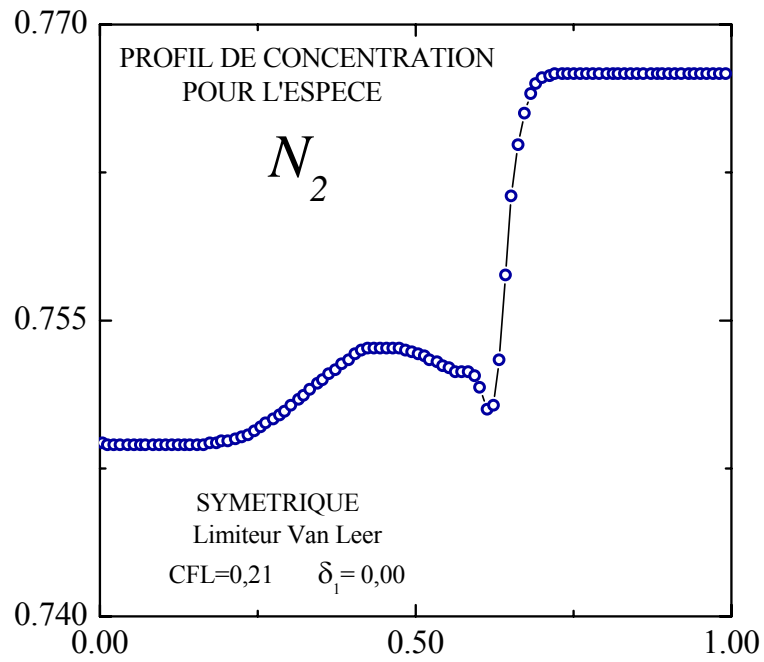
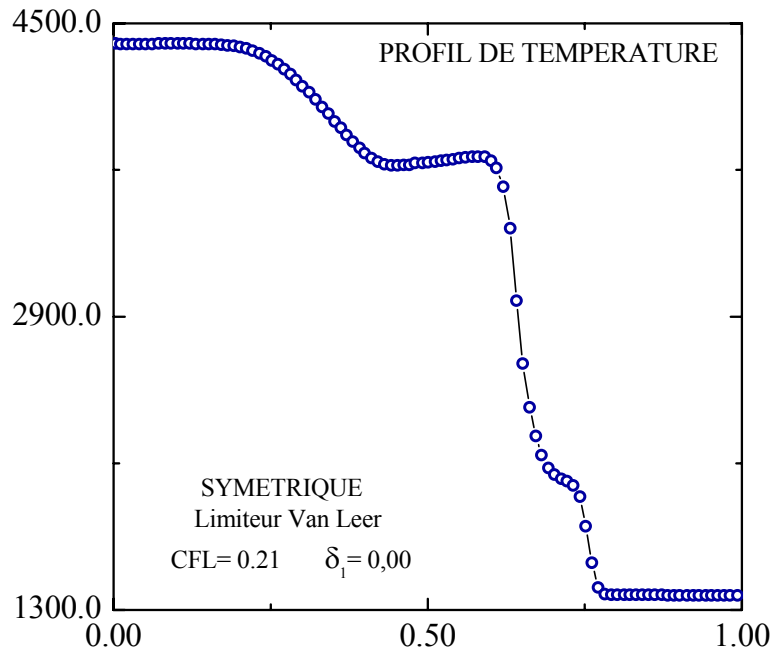


Figure 15.8 (suite)

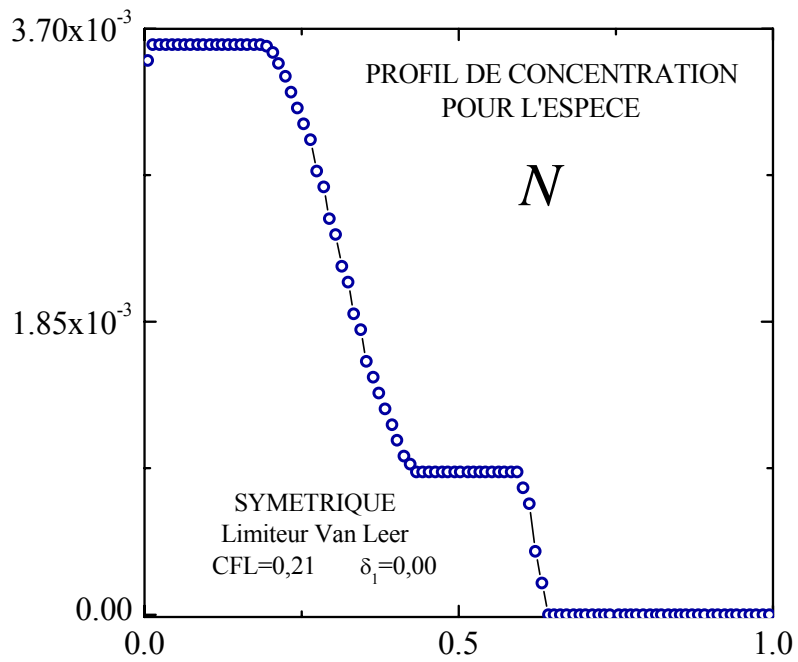
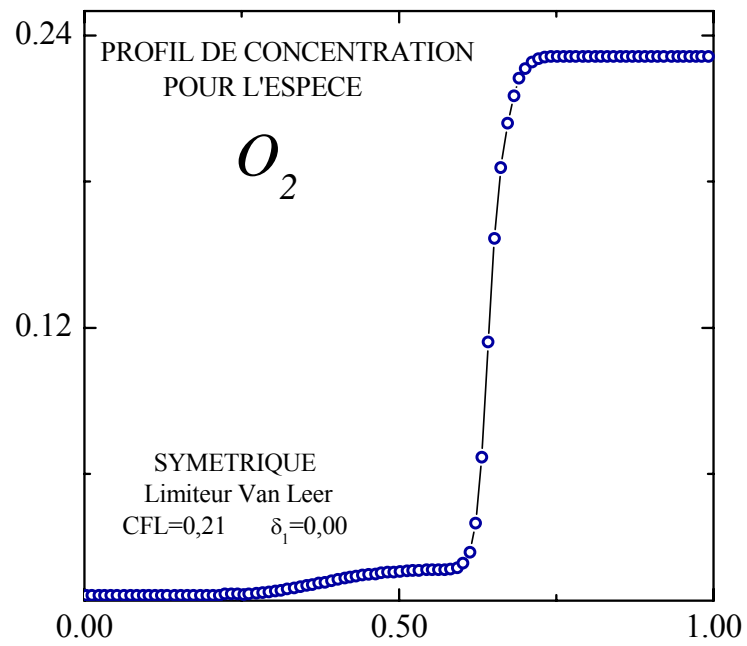


Figure 15.8 (suite)

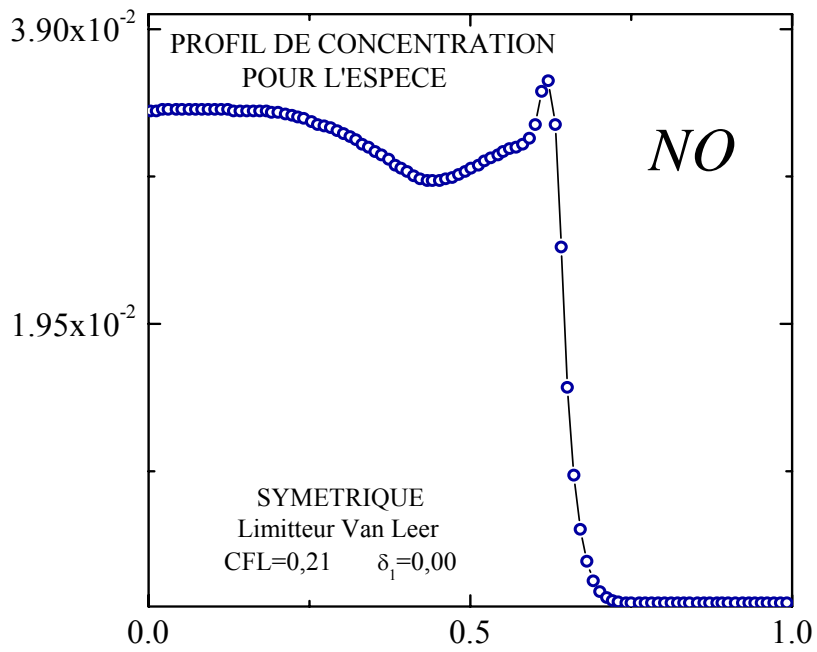
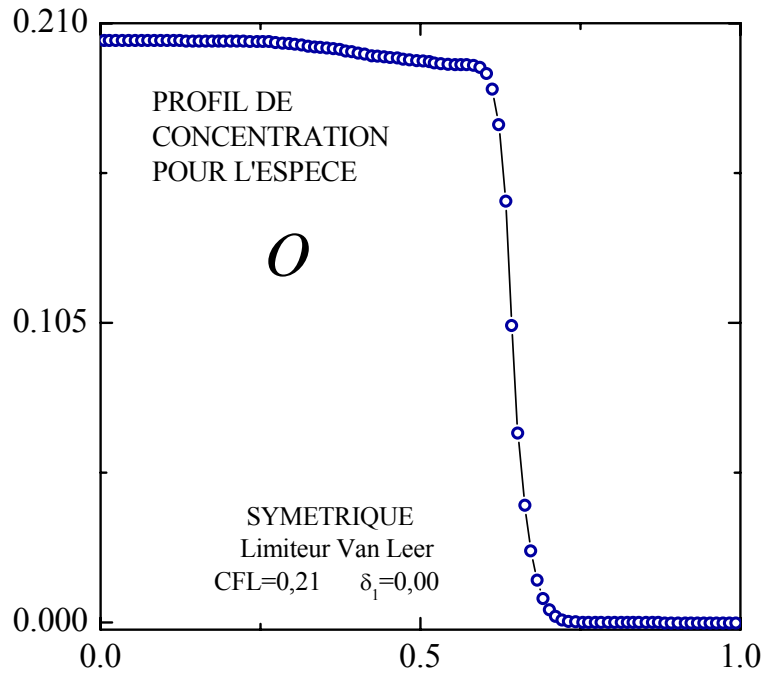


Figure 15.8 (suite et fin)

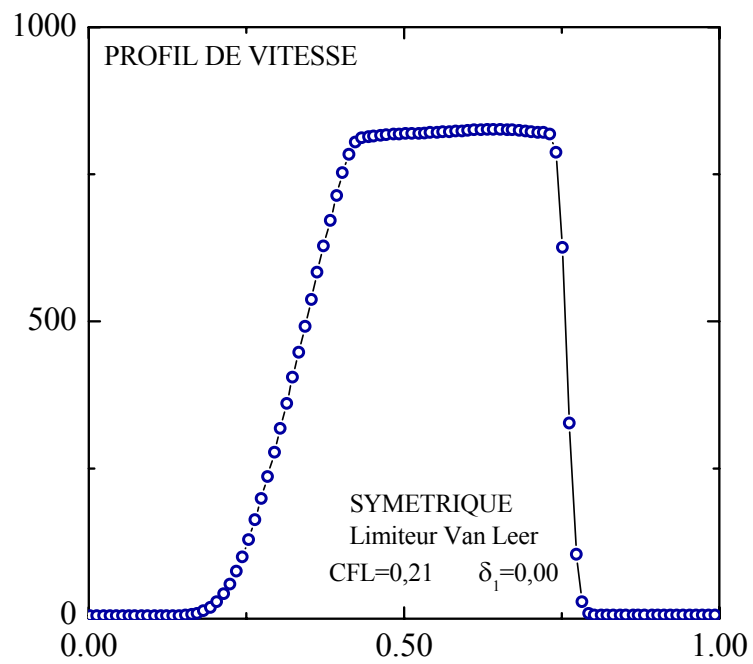
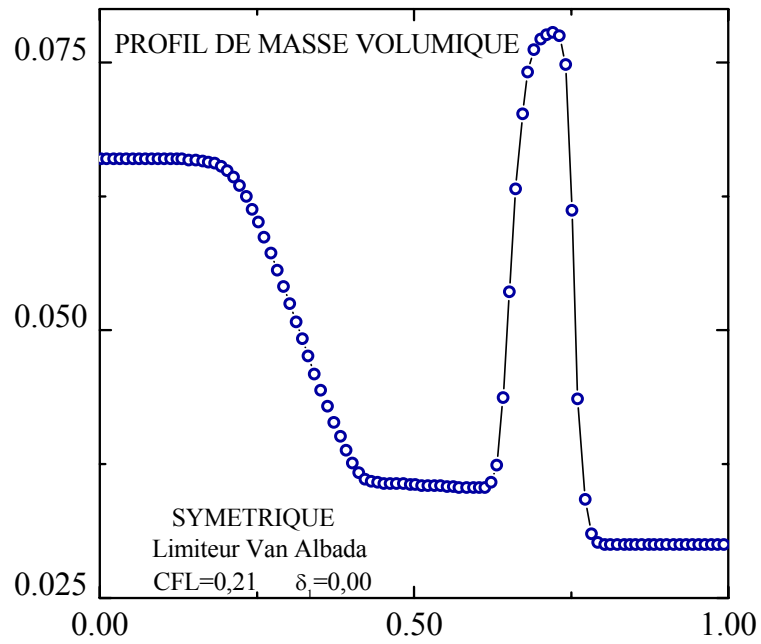


Figure 15. 9 : Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma symétrique Et limiteur (11.21)

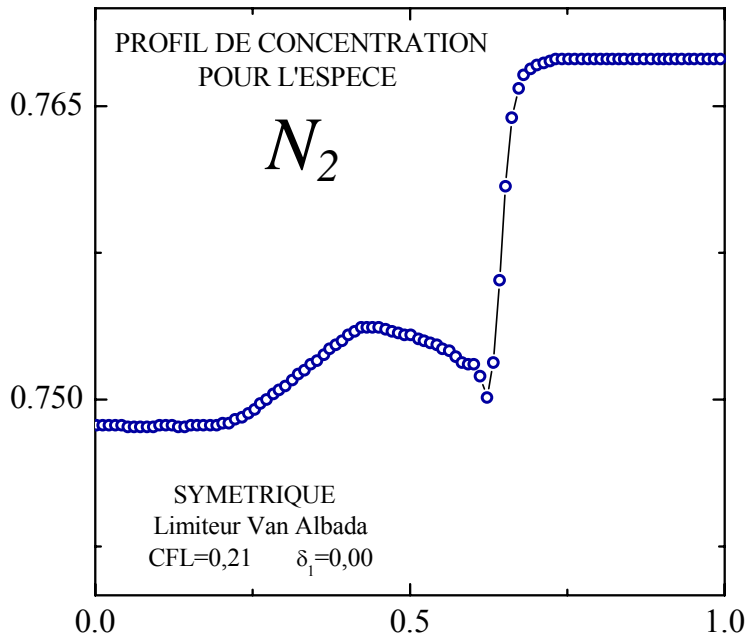
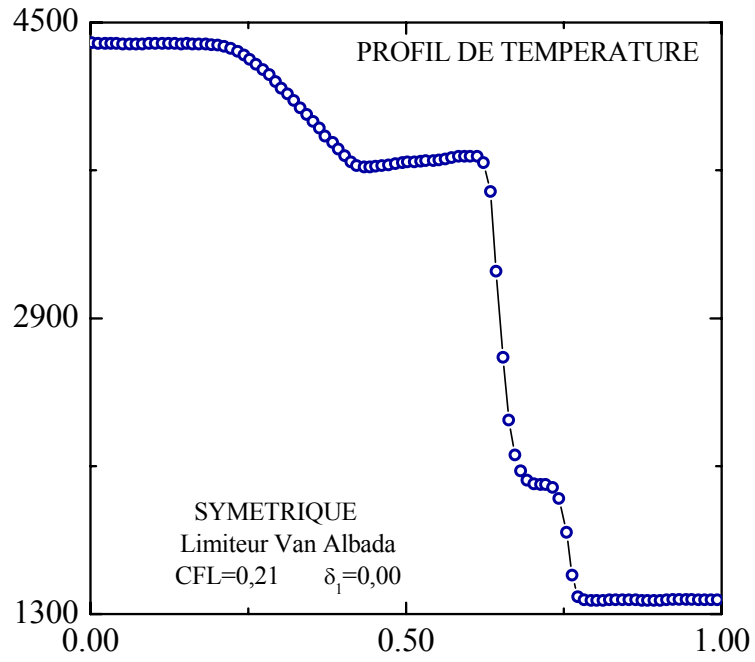


Figure 15.9 (suite)

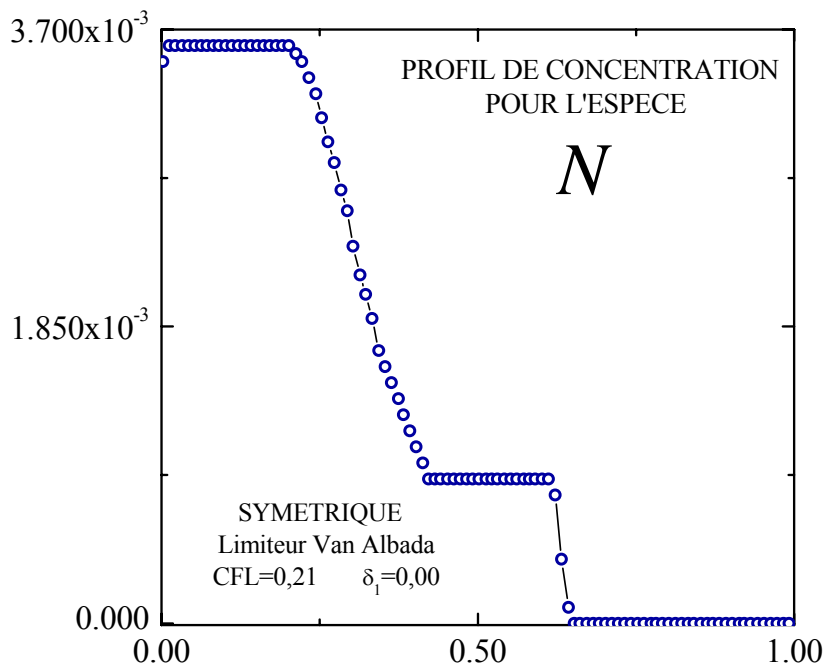
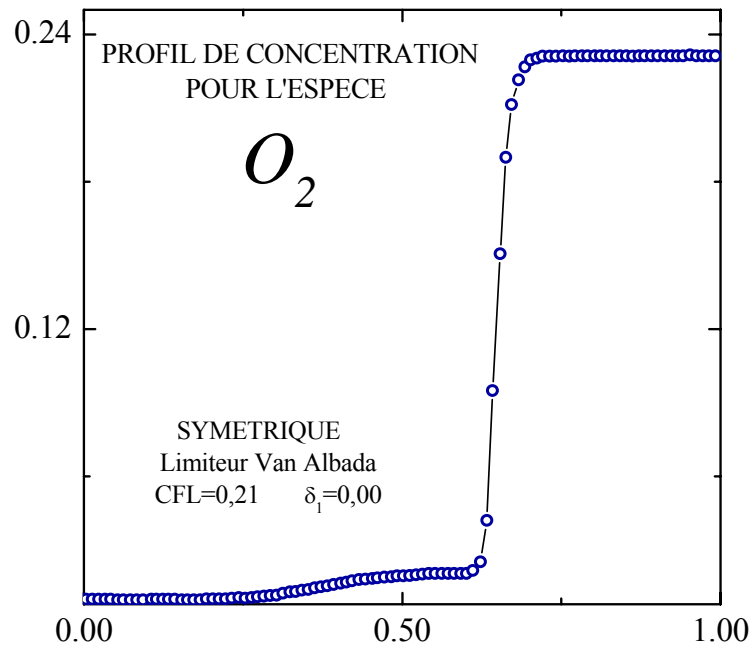


Figure 15.9 (suite)

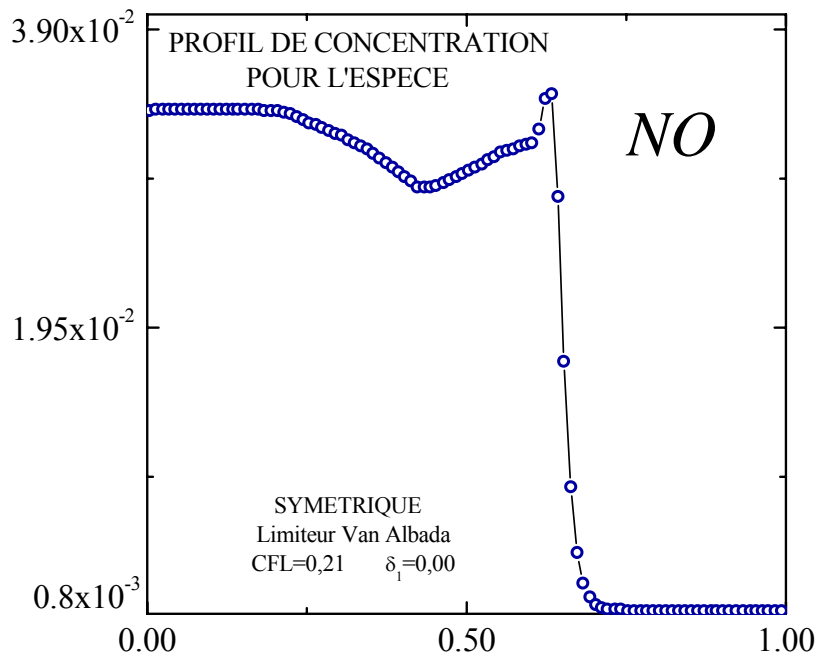
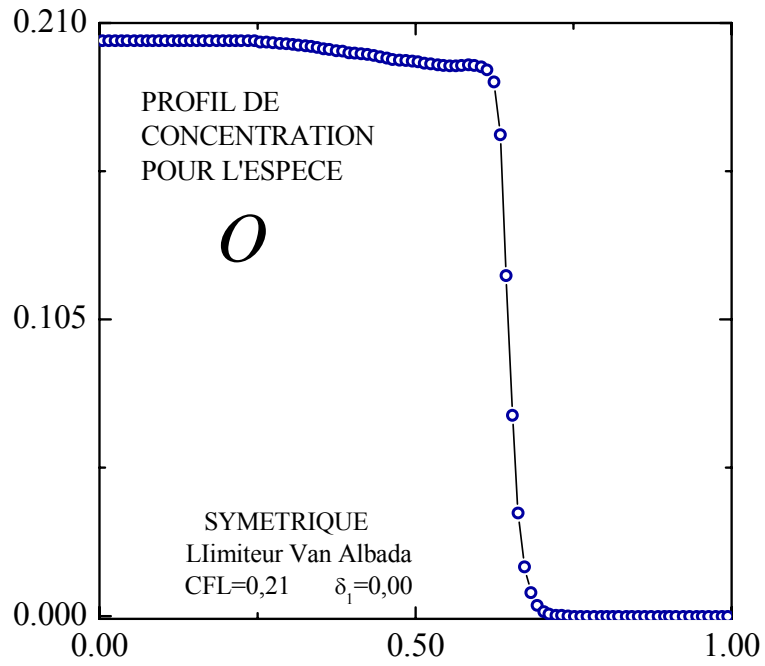


Figure 15.9 (suite et fin)

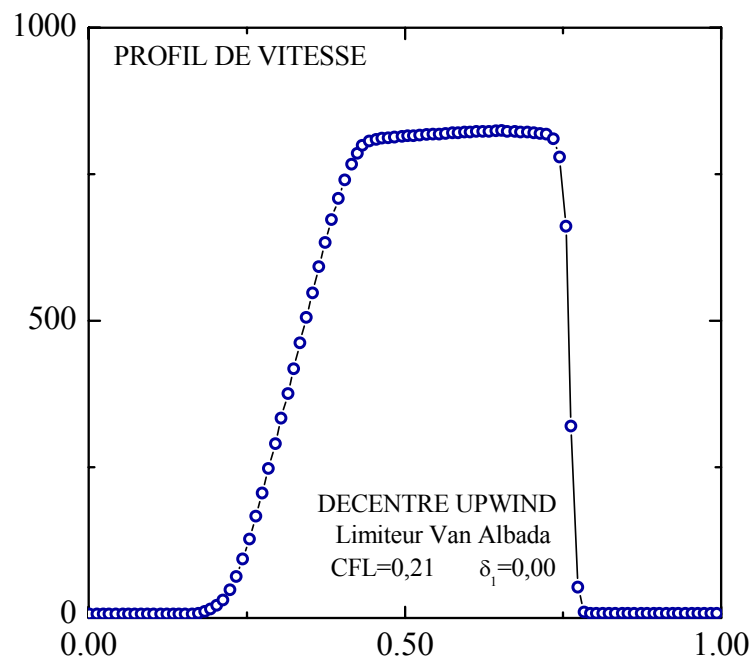
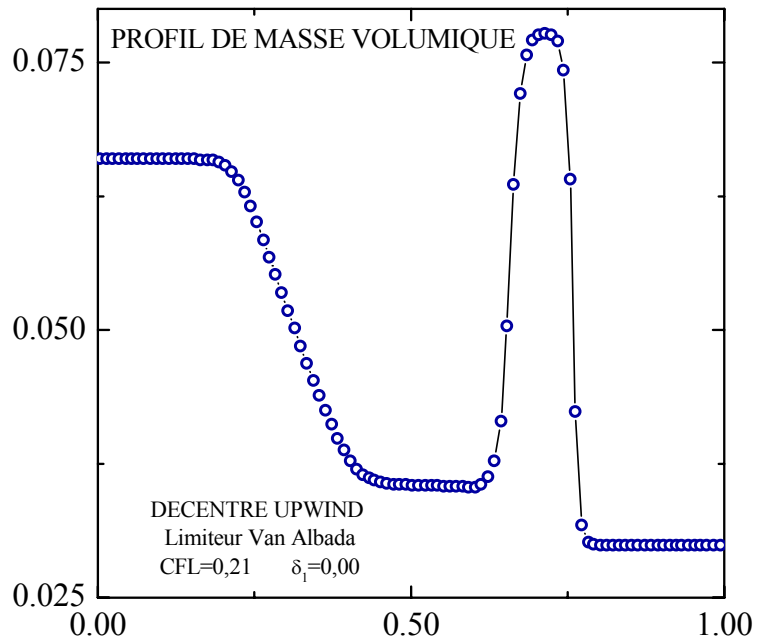


Figure 15.10: Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma décentré upwind et limiteur (11.16)

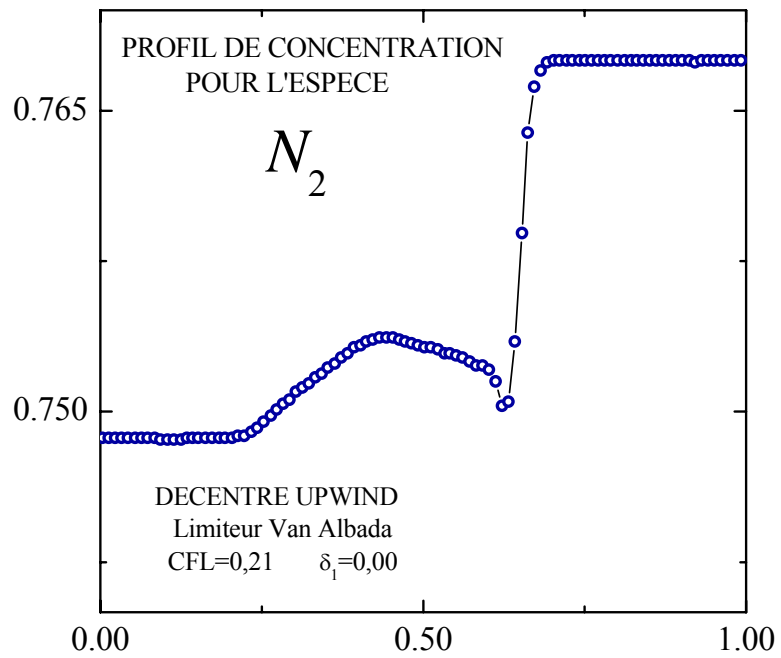
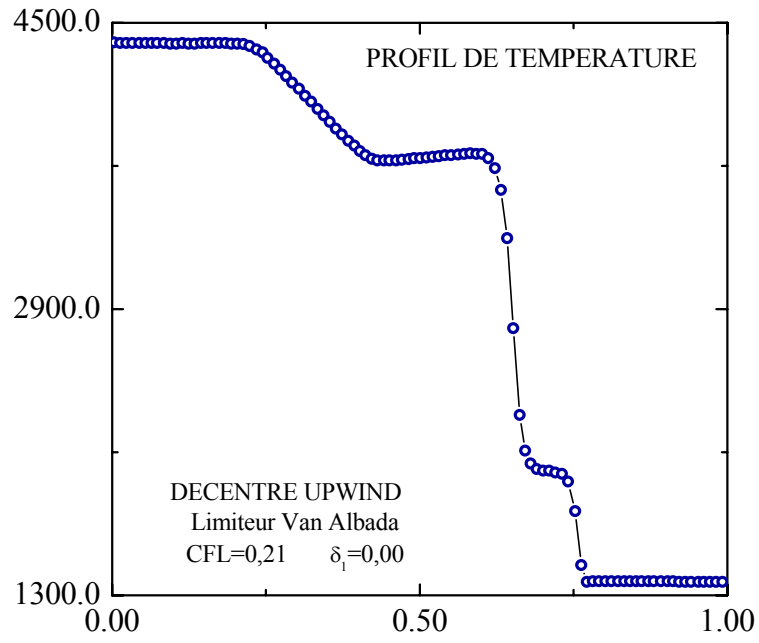


Figure 15.10 (suite)

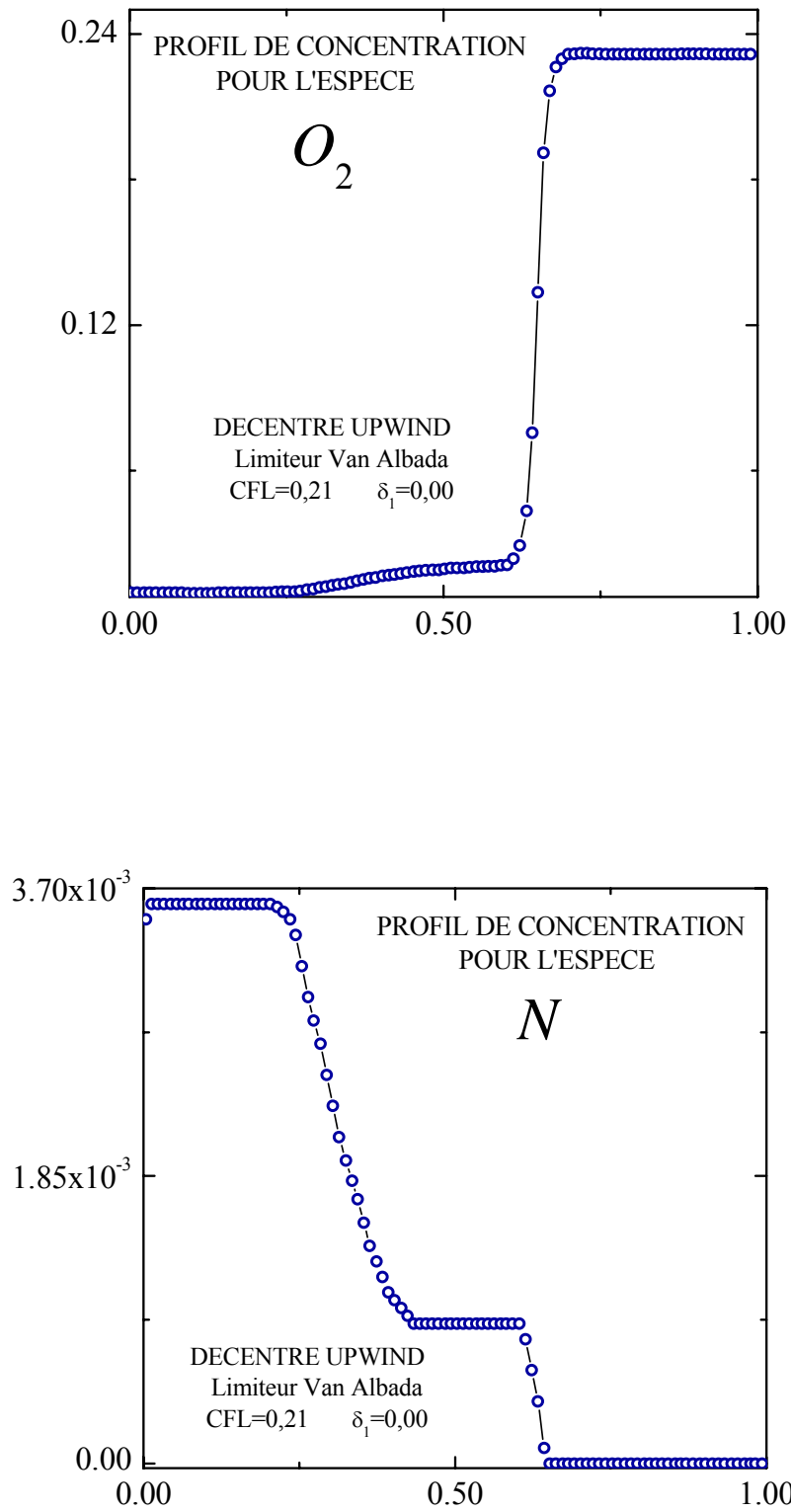


Figure 15.10 (suite)

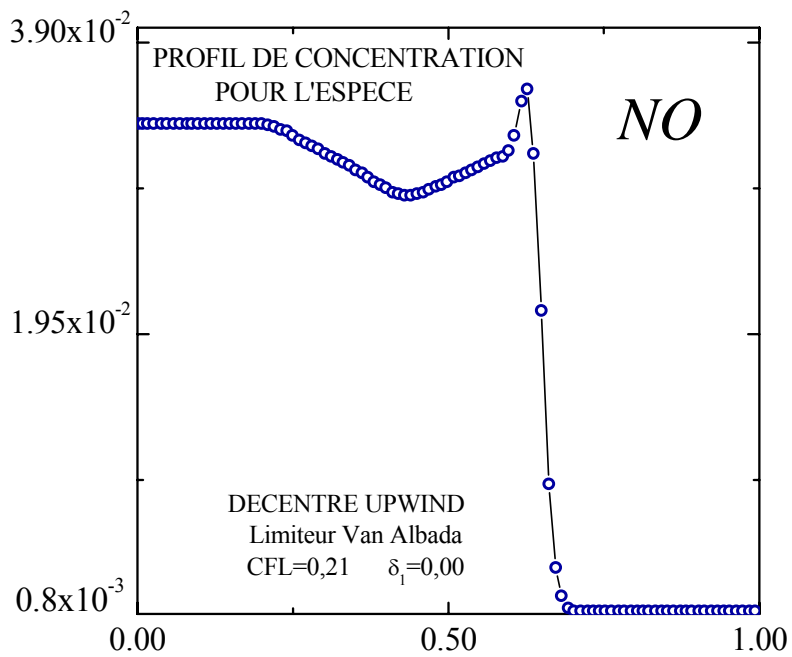
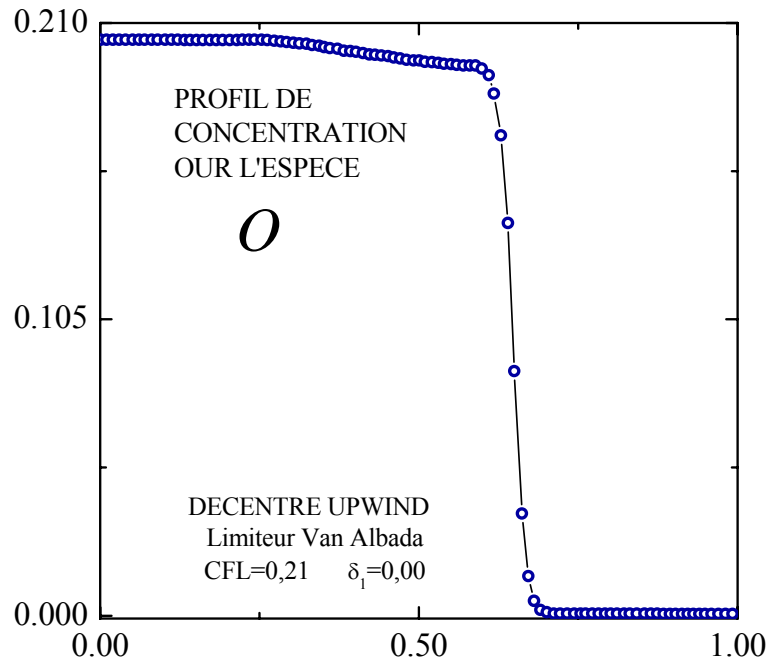


Figure 15.10 (suite et fin)

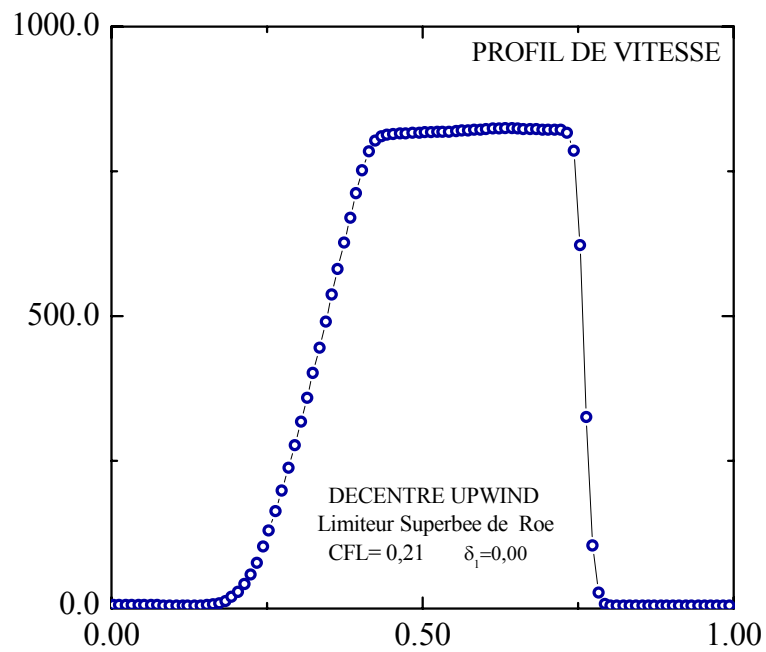
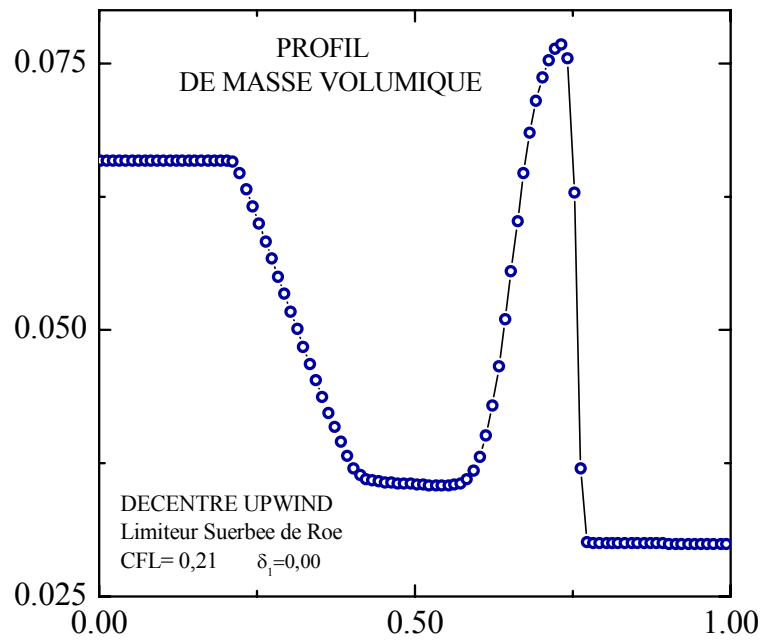


Figure 15. 11 : Tube à choc (mélange de gaz réactifs) : schéma décentré upwind et limiteur (11.18)

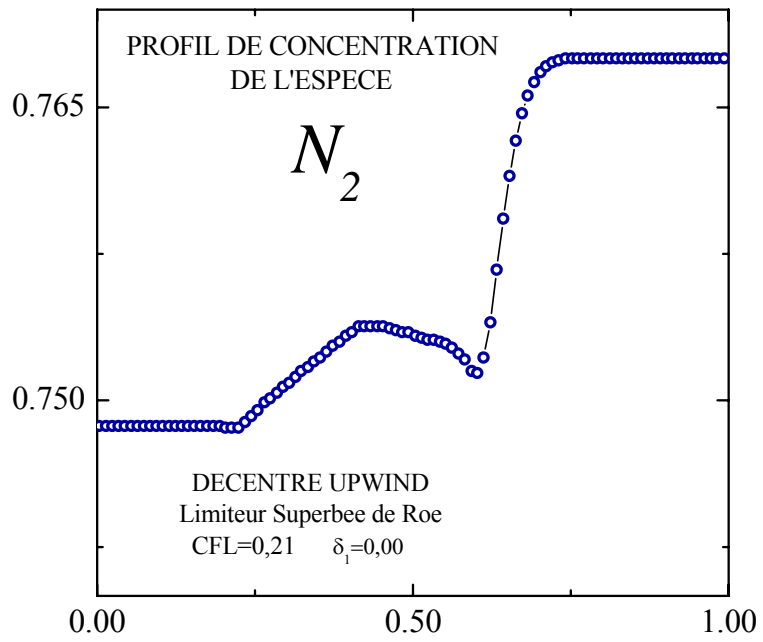
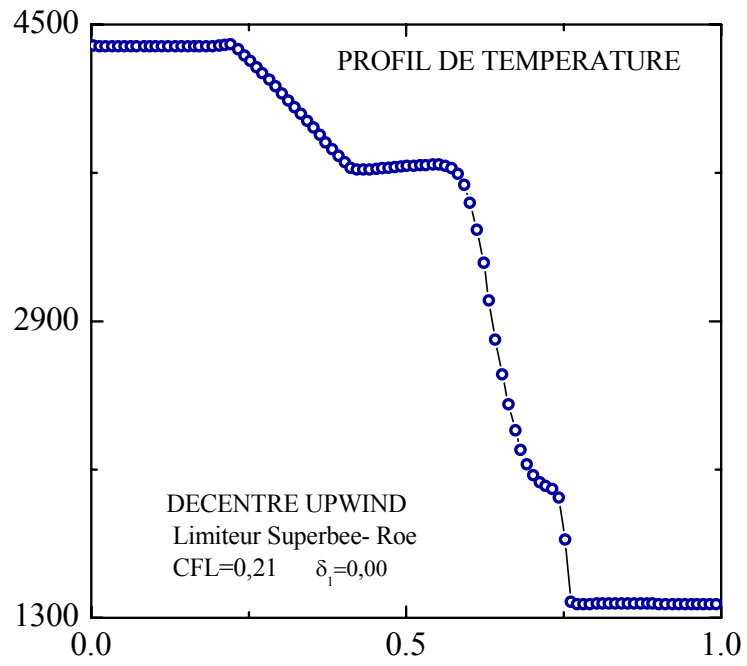


Figure 15.11 (suite)

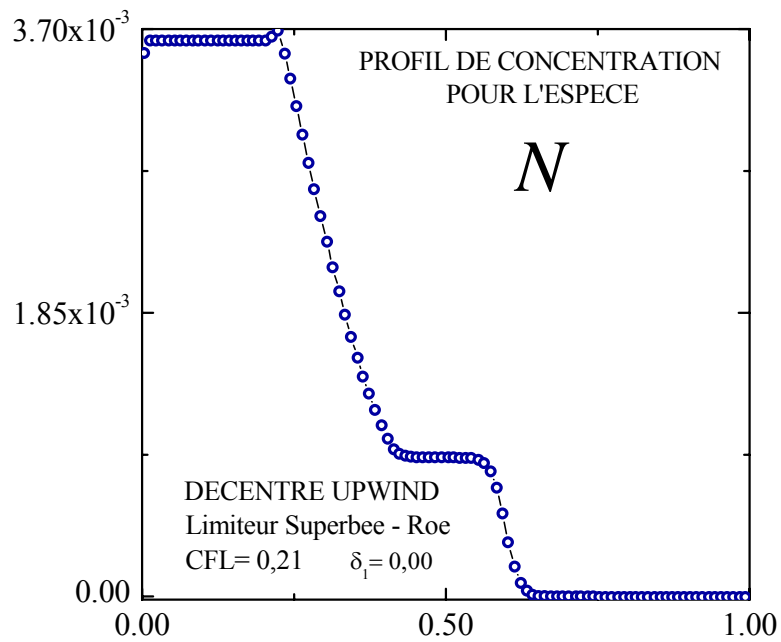
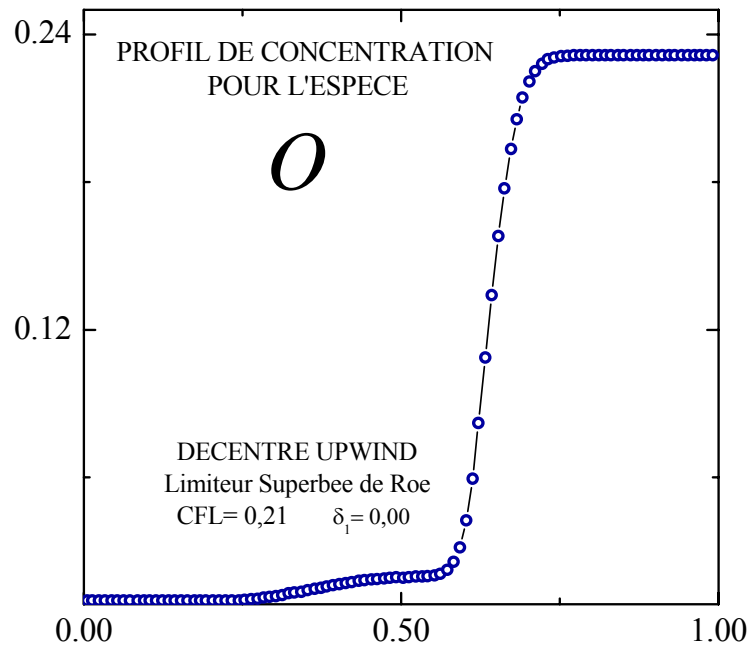


Figure 15.11 (suite)

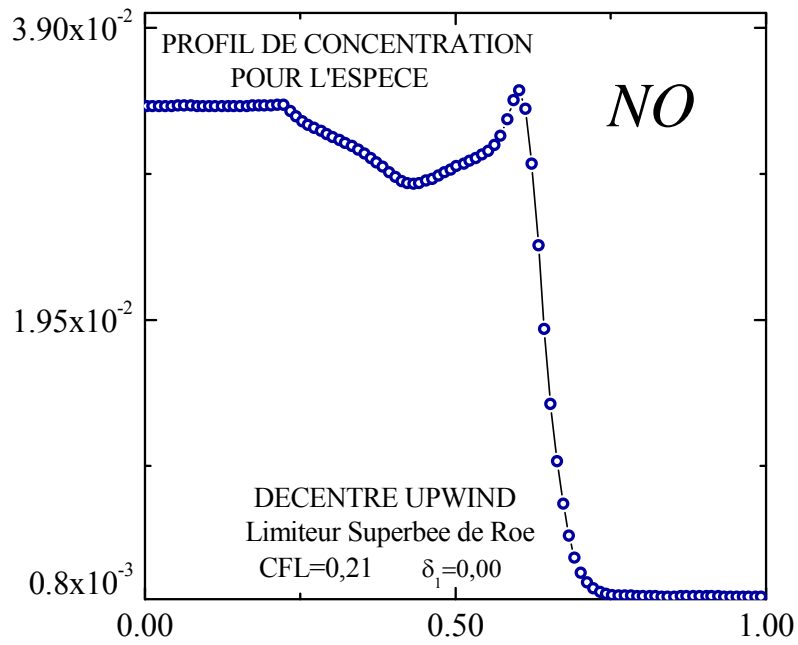
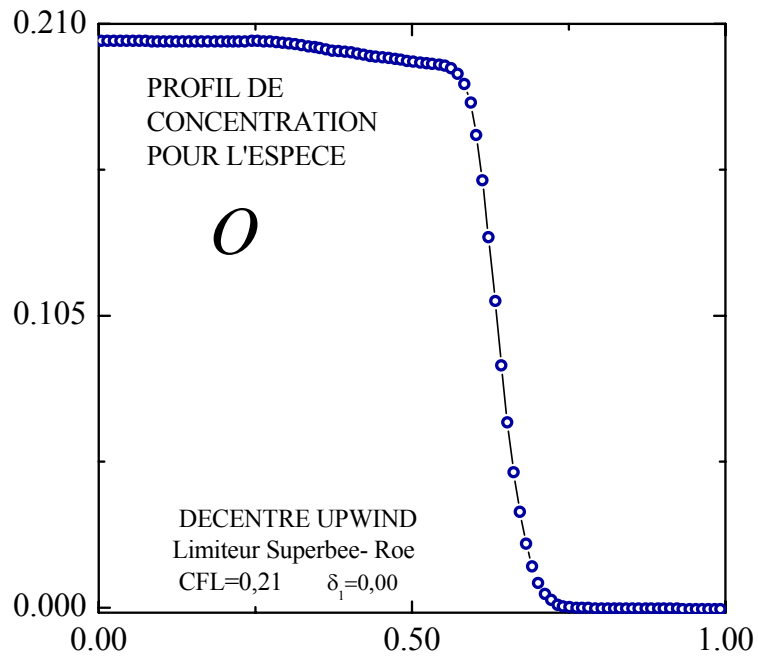


Figure 15.11 (suite et fin)

Dans le cas d'un gaz réactif, le schéma a toujours la possibilité de capturer correctement les trois ondes. Les fractions massiques restent bien constantes à la traversée de l'onde de choc mais varie maintenant au cours de la détente à cause de la présence des termes sources. L'oscillation à la discontinuité de contact relevée lors de cette étude d'un mélange de gaz inertes est toujours présente, et se traduit par un pic sur le profil de fraction massique de monoxyde d'azote. En effet, la fraction massique de monoxyde d'azote est une fonction fortement non monotone de la température et est plus stable à des températures intermédiaires qui apparaissent à cause de l'étalement numérique de la discontinuité de contact [123].

Les différences entre les profils, liées au choix du schéma ou du limiteur, apparaissent principalement à la discontinuité de contact. L'amplitude de l'oscillation des fractions massiques dépend du limiteur choisi : le limiteur superbee par exemple entraîne une oscillation moins marquée mais la discontinuité est plus large et plus étalée.

Un maillage quasi doublé comportant 201 points a aussi été testé en gardant la même valeur du nombre de *CFL*. On vérifie que la localisation des ondes est identique à celle donnée avec un maillage de 101 points. La résolution est meilleure pour la détente et l'onde de choc comporte le même nombre de points intérieurs. Les pics observés sur les fractions massiques d'azote et de monoxyde d'azote restent présents. Les profils sont tracés sur la figure 15.12.

Conclusion

Pour des applications à des écoulements bidimensionnels, un schéma symétrique (avec le limiteur (11.20)) a finalement été retenu pour les raisons suivantes :

- Sa mise en œuvre est plus simple que celle du schéma décentré upwind et requiert moins d'opérations
- Etant plus dissipatif, il s'est avéré plus stable que le schéma décentré upwind (la valeur de 0.21 du nombre de *CFL* a été imposée pour la stabilité du schéma décentré upwind).

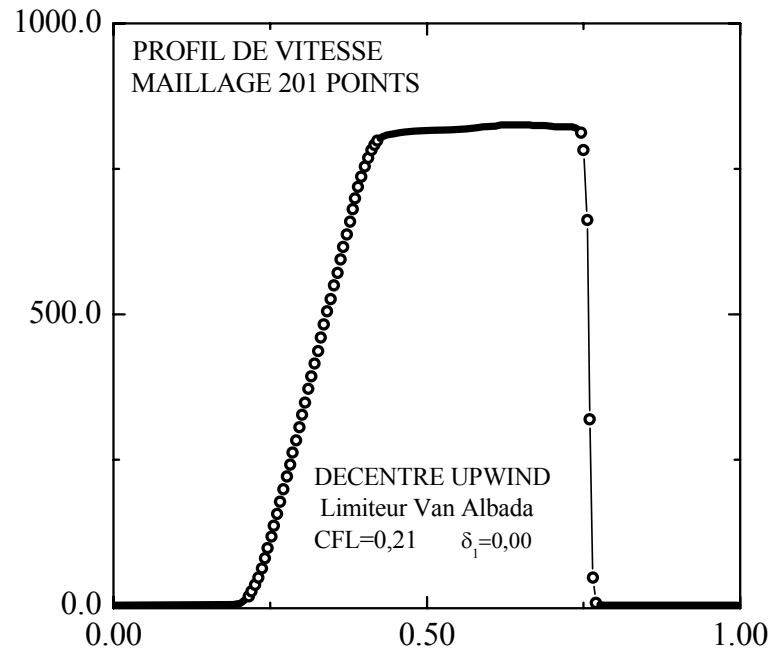
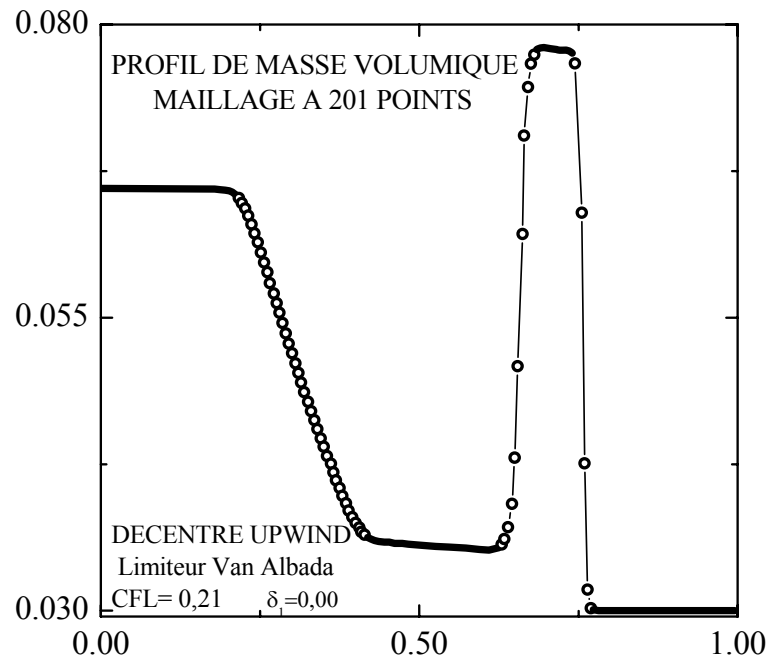


Figure 15. 12 : mélangez de gaz réactifs, maillage à 201 points

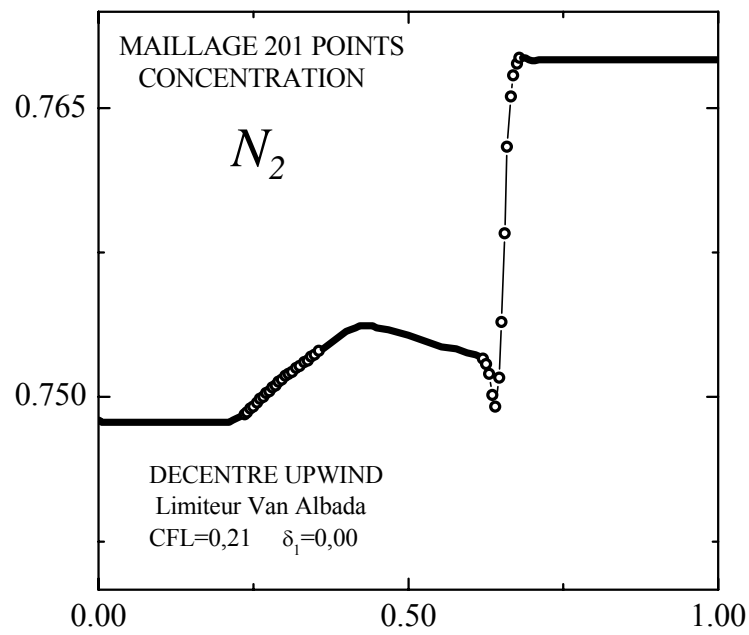
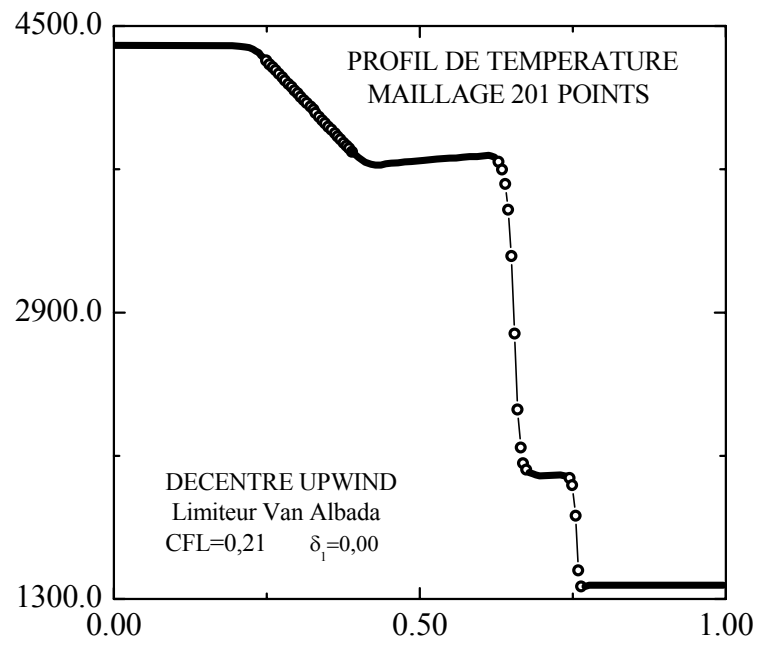


Figure 15.12 (suite)

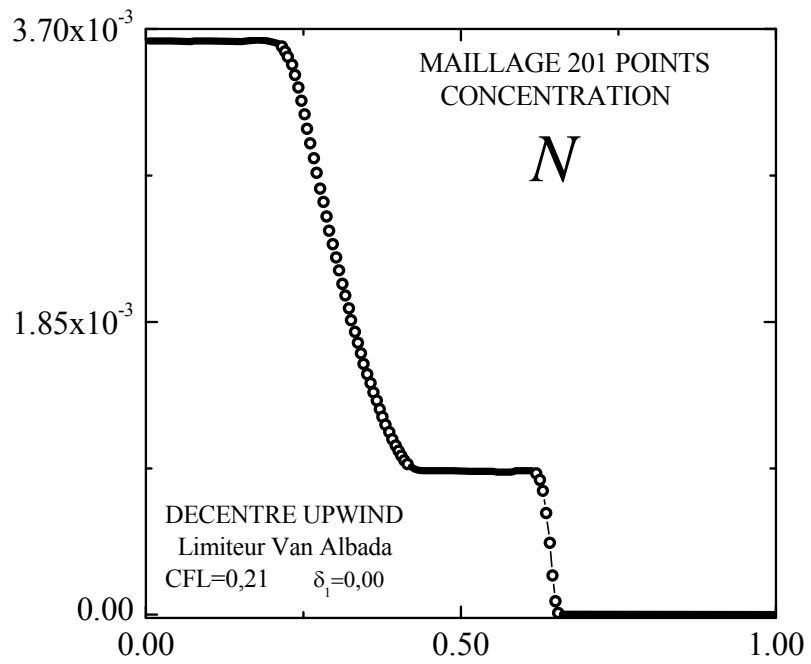
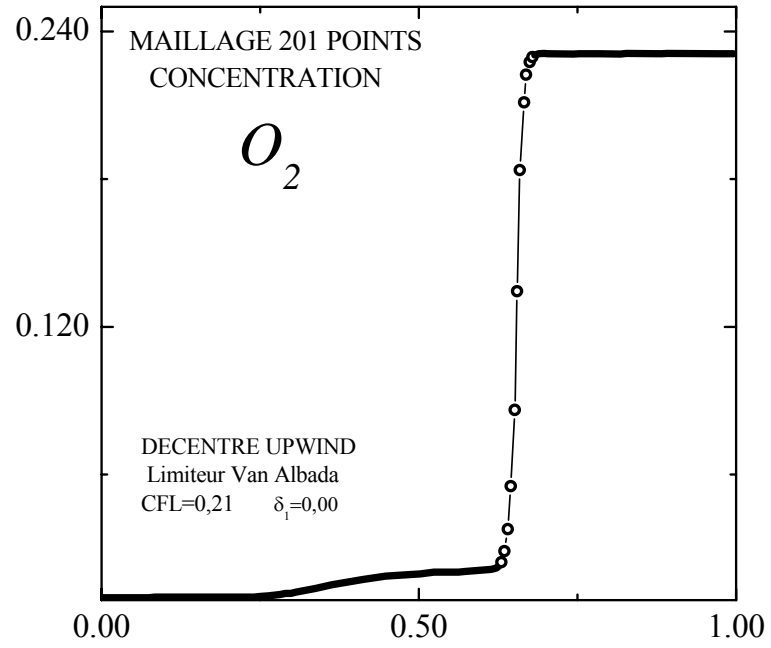


Figure 15.12 (suite)

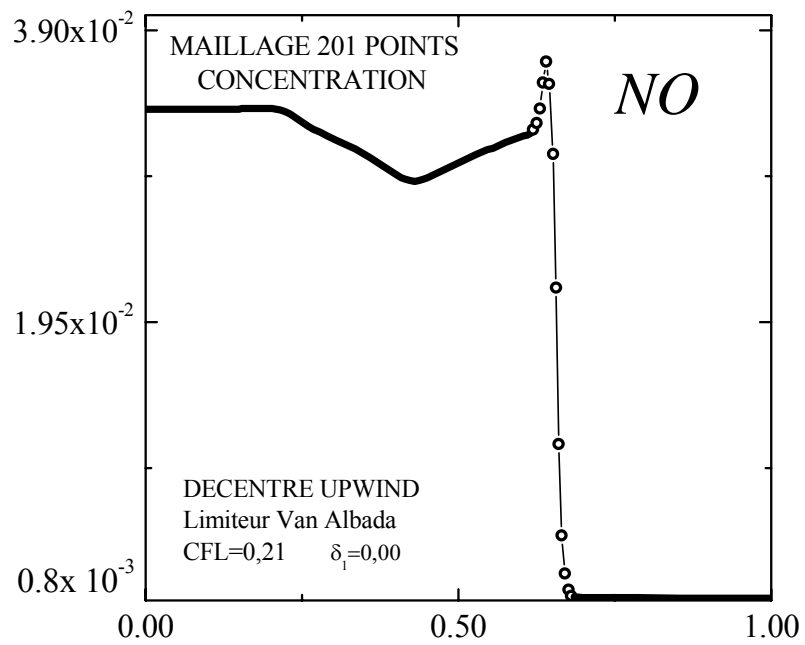
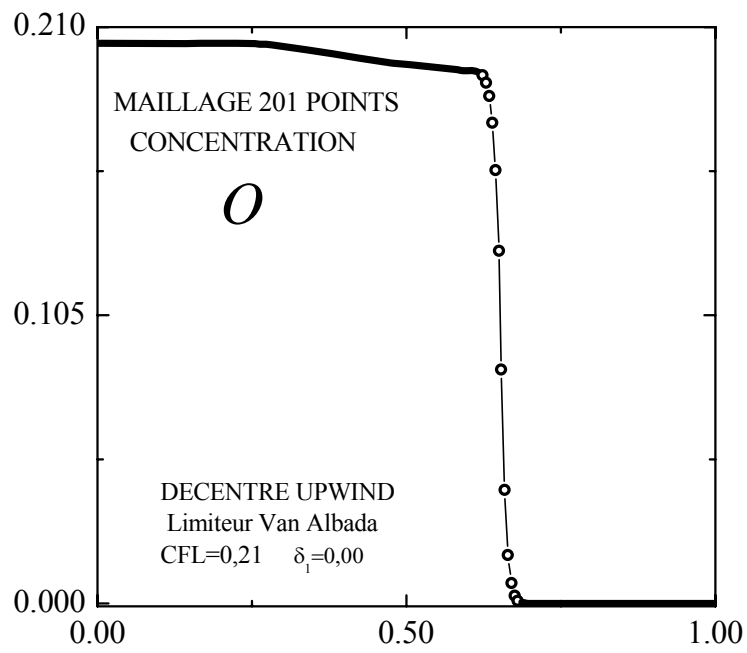


Figure 15.12 (suite et fin)

Chapitre 16

16. Tests de validation du code

Nous présentons ici les résultats obtenus sur trois géométries différentes pour des écoulements réactifs. Pour chaque configuration, une comparaison avec des données expérimentales ou d'autres numériques est effectuée.

16.1. Ecoulement autour d'une double ellipse

16.1.1. Présentation

La double ellipsoïde a été défini pour étudier l'écoulement autour du nez des navettes spatiales (shuttle, hermès...etc.). Cette géométrie a été étudiée d'un point de vue expérimental au CEAT à Poitiers [11], [34]. Elle a d'autre part fait l'objet de plusieurs recherches et contributions dans le domaines de la simulation numérique ; et pour lequel les effets du déséquilibre sont importants et les plus remarquables [150] et [151]. Les conditions de calcul proposées [37] sont données dans le tableau 16.1, où α est l'angle d'incidence et H_∞ l'enthalpie totale à l'infini amont. Seul le cas test à $M_\infty = 25$ est exposé ici car il a regroupé le plus de contributions et pour lequel les effets de déséquilibre sont les plus importants.

16.1.2. Analyse de l'écoulement

Les conditions de calcul proposées par le workshop sont données dans le tableau 16.1, où α est l'angle d'incidence et H_∞ l'enthalpie totale à l'infini amont. Avec ces conditions, on obtient un nombre de Knudsen rapporté au demi grand axe de l'ordre de $3 \cdot 10^{-3}$. l'hypothèse d'un milieu continu est donc tout a fait justifiée. Les caractéristiques de la géométrie sont détaillées sur la figure 16.1

Tableau 16. 1 : Conditions de calcul pour la double ellipse

Paramètres de Calcul		
$M_\infty = 25$	$Re/m = 2.2 \cdot 10^4$	$\alpha = 30^\circ$
$P_\infty = 2.52 \text{ Pa}$	$T_\infty = 205.3 \text{ }^\circ\text{K}$	$H_\infty = 2.61 \cdot 10^7 \text{ J/kg}$
$Le = 1.2$	μ : Wilke, Blottner	λ : Wilke, Eucken
Demi axe = 0.6 m	$T_p = 1500 \text{ }^\circ\text{K}$	Catalyse nulle

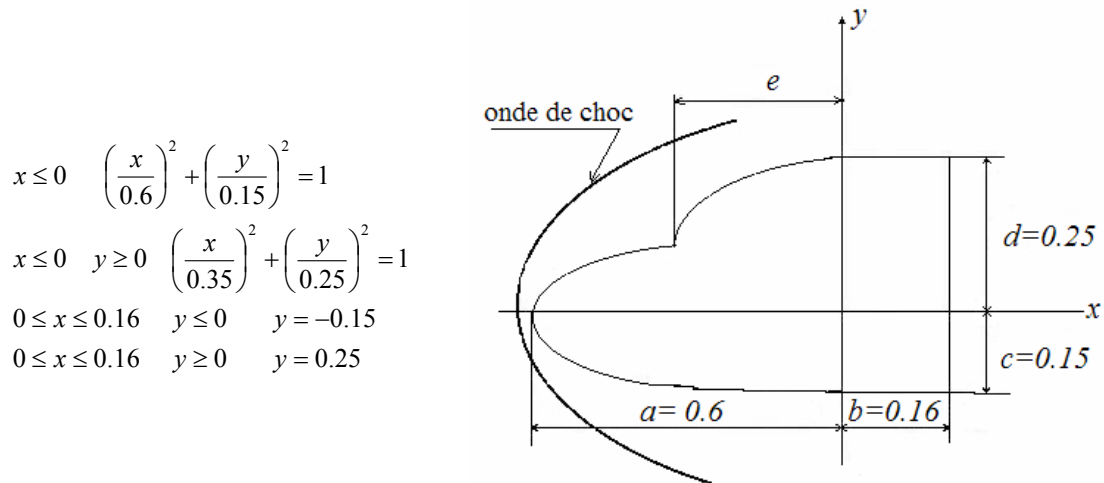


Figure 16.1: Définition de la géométrie de la double ellipse

La géométrie de la double ellipse en incidence représente un cas test difficile notamment par la présence de la verrière. La forte valeur M_∞ amont implique tout d'abord la présence d'une forte onde de choc détachée. Au sein de la couche de choc, dans la région du point d'arrêt, la dissociation de l'oxygène et quasiment immédiate, puis intervient celle de l'azote. Au fur et à mesure que l'on s'éloigne du point d'arrêt, l'intensité de ces phénomènes diminue.

A la paroi, l'écoulement, accéléré depuis le point d'arrêt, est recomprimé par la verrière du cockpit ce qui peut entraîner un décollement de la couche limite. Une zone de recirculation prend alors naissance au niveau de la verrière, caractérisée par des coefficients de frottement pariétaux négatifs. Le coefficient de pression à la paroi est alors localement constant tandis que le flux de chaleur pariétal est maximum au point de décollement de la couche limite.

Les lignes iso température, iso nombre de Mach et iso coefficient de pression (figures 16.2, 16.3 et 16.4) montrent qu'effectivement le schéma numérique permet de capturer adroitement le onde de choc détachée. Le gradient de température à travers la couche de choc est dû à la dissociation moléculaire. En effet, ces réactions sont endothermiques et diminuent donc la température. Le gradient est clairement mis en évidence sur le profil de température le long de l'axe des ellipses (voir figure 16.5). Sur cette figure, on peut aussi noter que l'onde de choc est capturée avec seulement 3 point extérieurs.

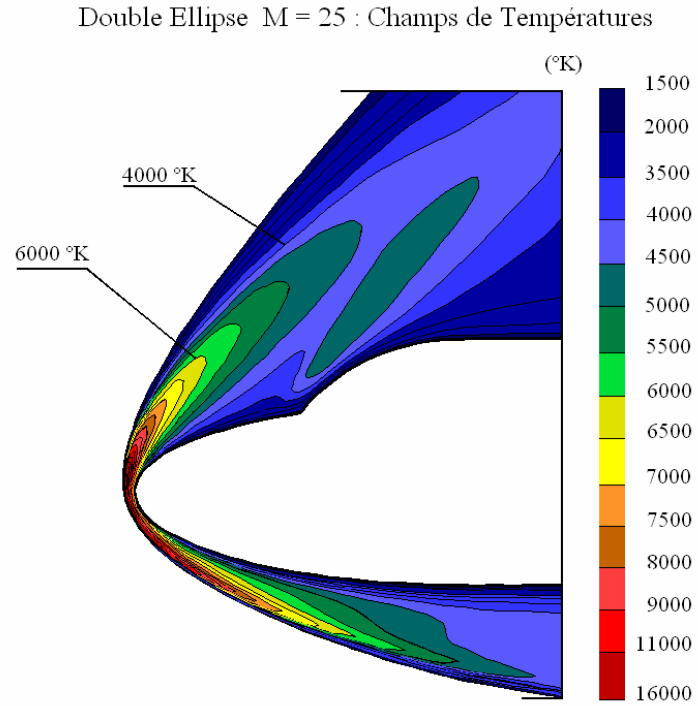


Figure 16.2: Lignes Iso température autour de la double ellipse

Double Ellipse $M = 25$: Champs Iso Nombre de Mach

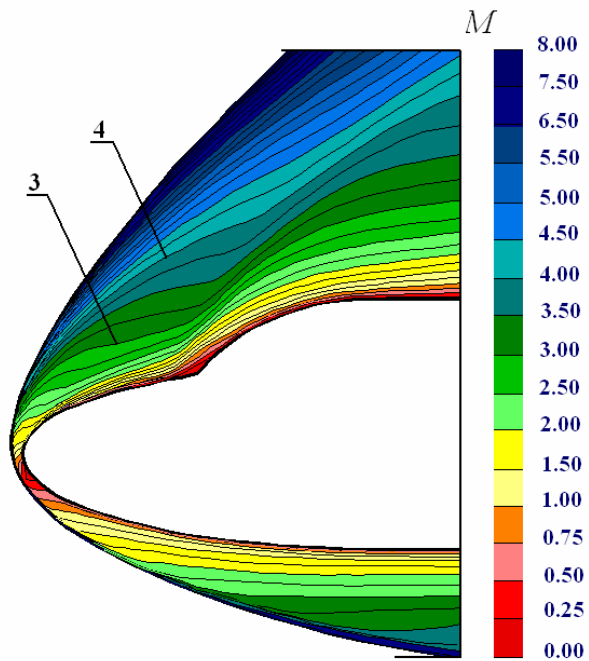


Figure 16.3 : Lignes Iso nombre de Mach autour de la double ellipse

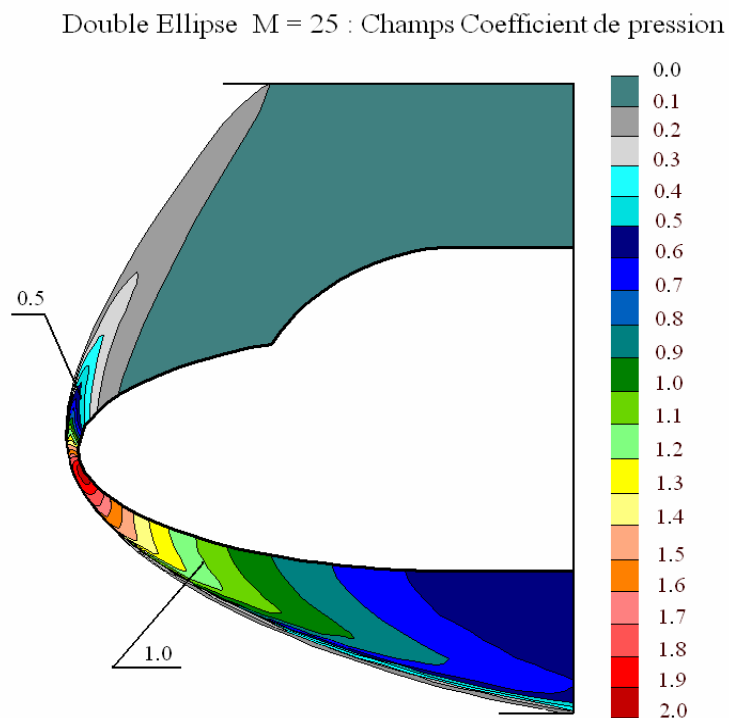


Figure 16.4: Lignes Iso Coefficient de pression autour de la double ellipse

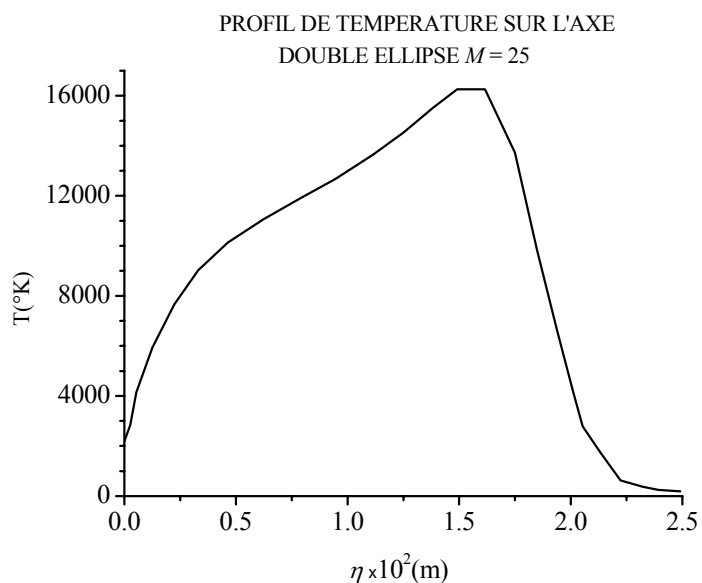


Figure 16.5: Profil de température le long de l'axe de la double ellipse à $M_\infty = 25$

Les lignes iso fraction massique d'azote et d'oxygène atomique et du monoxyde d'azote (figures 16.6, 16.7 et 16.8) illustrent également les phénomènes décrits précédemment : les forts gradients de fraction massique d'oxygène interviennent juste derrière l'onde de choc tandis que ceux d'azote sont obtenus plus près de la paroi. Le pourcentage du monoxyde d'azote NO n'excède pas les 8%. Les profil des fractions massiques sur l'axe sont donnés sur la figure 16.9.

Double ellipse $M = 25$: Iso Fraction Massique
Nitrogène Atomique

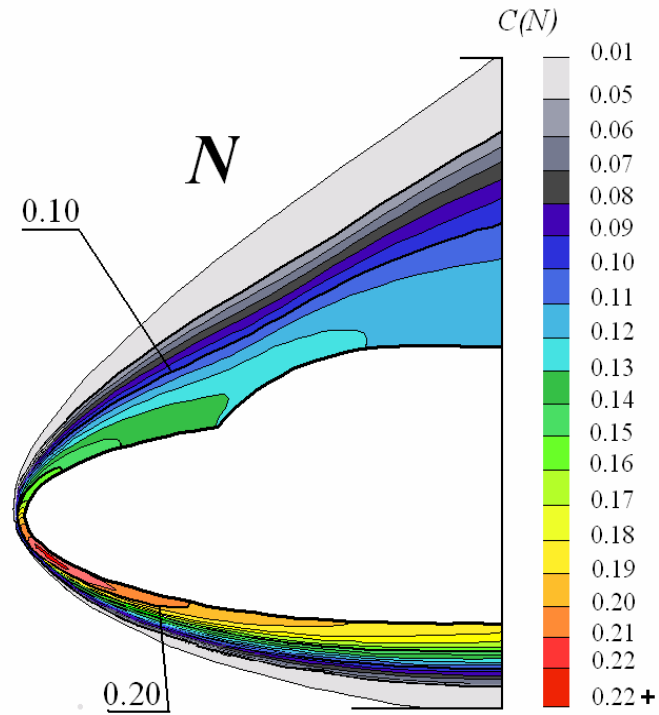


Figure 16.6: Lignes Iso fraction massique d'azote autour de la double ellipse

Double ellipse $M = 25$: Iso Fraction Massique
Oxygène Atomique

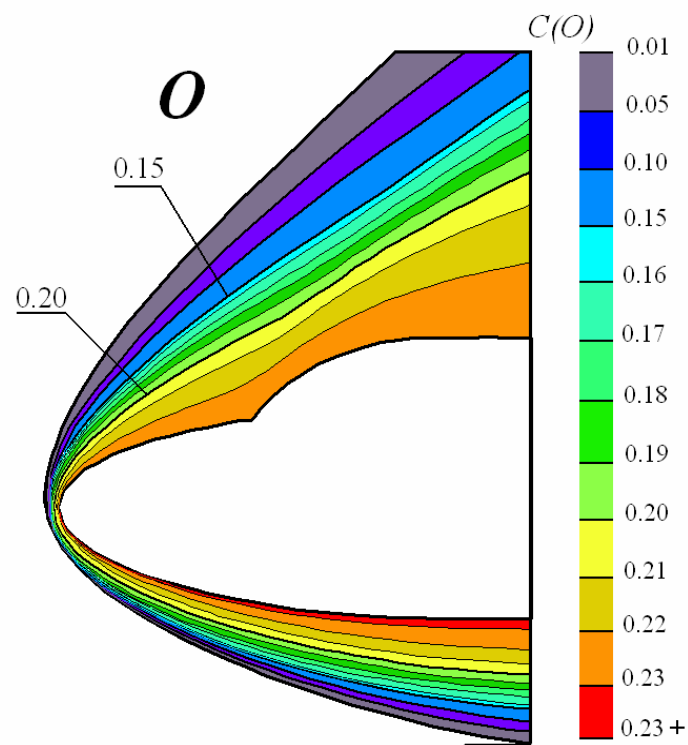


Figure 16.7: Lignes Iso fraction massique d'oxygène autour de la double ellipse

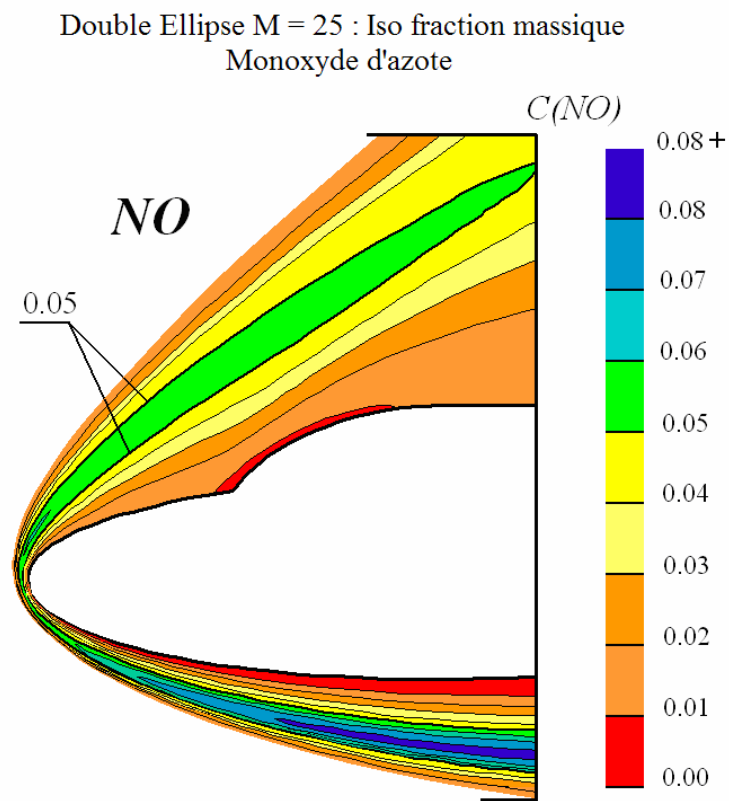


Figure 16.8: Lignes Iso fraction massique de *NO* autour de la double ellipse

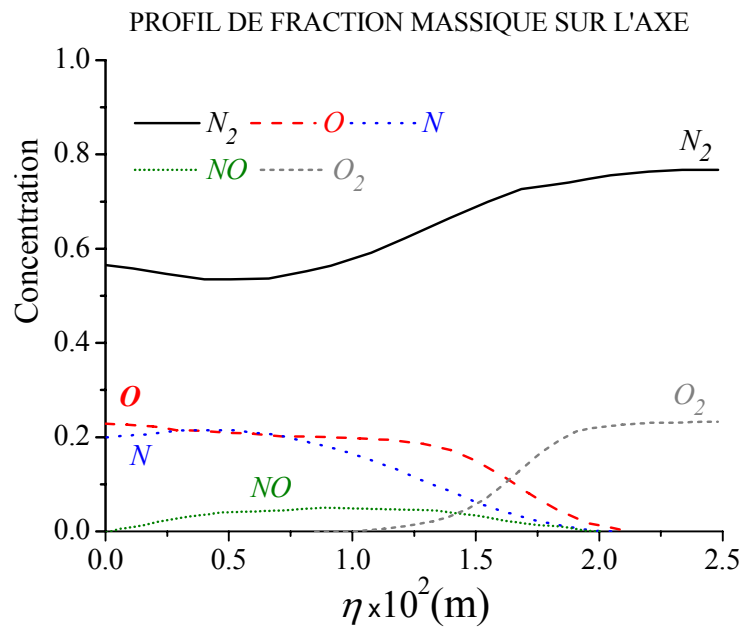


Figure 16.9: Profils de fraction massique le long de l'axe de la double ellipse à $M_\infty = 25$

16.1.3. Comparaison avec d'autres résultats

Ce cas tests à été choisi par plusieurs groupes de recherche [6], [13] [33], [108] et [110]. Dans l'ensemble des contributions, l'hypothèse d'un mélange de cinq composants réactifs en équilibre thermique a été retenue. Les données de Park dans le calcul des taux de production chimique ont été utilisées par pratiquement la majorité des recherches établies sur ce cas de figure.

La comparaison qualitative des iso lignes avec d'autres résultats [13, 34 et 23] a montré que toutes les contributions sont comparables et donnent une même distance de détachement de l'onde de choc .la comparaison des résultats à la paroi est plus intéressante. Le coefficient de pression $C_p = (P - P_\infty) / (0.5 \rho_\infty u_\infty^2)$. C_p donne un bon rassemblement des valeurs .Ceux de frottement C_f et le nombre de Stanton :

$$C_f = \frac{\tau_p}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2} \quad St = \frac{\phi_p}{\rho_\infty u_\infty C_p (T_{0\infty} - T_p)} \quad (16.1)$$

où τ_p est le taux de cisaillement à la paroi , ϕ_p le flux de chaleur pariétal , $T_{0\infty}$ la température d'arrêt isentropique. Les résultats pour ces grandeurs font apparaître des disparités plus importantes, notamment près du point d'arrêt où l'écart maximum atteint les 25 % .Les valeurs maximales obtenues pour C_f (resp. St) sont comprise entre 0.09 et 0.12 (resp. 0.092 et 0.12) (voir les figures 16.10, 16.11 et 16.12 où l'on a fait figurer les écarts maximaux en quelques point significatifs). La présente méthode de calcul donne un C_f maximum de 0.98 ce qui est légèrement inférieur à la moyenne (1.05) ; le nombre St est aussi sous estimé (0.96 pour une moyenne de 1.08). On remarquera que le coefficient de frottement devient très légèrement négatif en amont de la verrière.

Les différences peuvent s'expliquer bien entendu par les choix du modèle de transport mais aussi, pour une large part, par les différences entre les maillages (dues non seulement au nombre total de points mais aussi à leur répartition et en particulier au resserrement près de la paroi). Nous avons testé ici deux maillages différents dont les caractéristiques sont données dans la tables 16.2 .La partie supérieure du maillage (au delà de la ligne de symétrie du nez) a été généré par un programme inspiré du principe du générateur de maillage développé à l'ONERA [65]. La partie inférieure a été construite analytiquement en utilisant un réseau d'ellipses et d'hyperboles orthogonales. Le maillage le plus fin, noté A, est représenté sur la figure 16.13. Où l'on a fait figurer qu'un point sur deux. Les résultats obtenus avec le maillage A conduisent à une augmentation de 7 % sur le C_f et 5 % sur le nombre St par rapport à ceux obtenus avec le maillage , noté B (voir figure 16.14) . Notons de plus que le maillage B ne permet pas d'obtenir la zone de recirculation près de la verrière. Nous rappelons que tous les résultats présentés dans cette étude ont été obtenus sur le maillage le plus fin.

Tableau 16. 2: caractéristiques des différents maillages

Maillage	$\Delta\xi$	$\Delta\eta$	$\Delta\eta_1$ (m)	$\Delta\eta_{\max}$ (m)	$\Delta\eta_1/\Delta\eta_{\max}$	$\Delta\xi_1$ (m)	r
A	166	74	$6.3 \cdot 10^{-5}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^{-2}$
B	114	61	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$	$5.3 \cdot 10^{-2}$

où :

- $r = \Delta\eta_1/\Delta\xi_1$: Allongement de la première maille
- $\Delta\eta_1$: Hauteur de la première maille par rapport à la paroi sur la ligne de symétrie du nez
- $\Delta\eta_{\max}$: Hauteur maximale d'une maille sur la ligne de symétrie du nez
- $\Delta\xi_1$: Distance de la première maille à la ligne de symétrie du nez

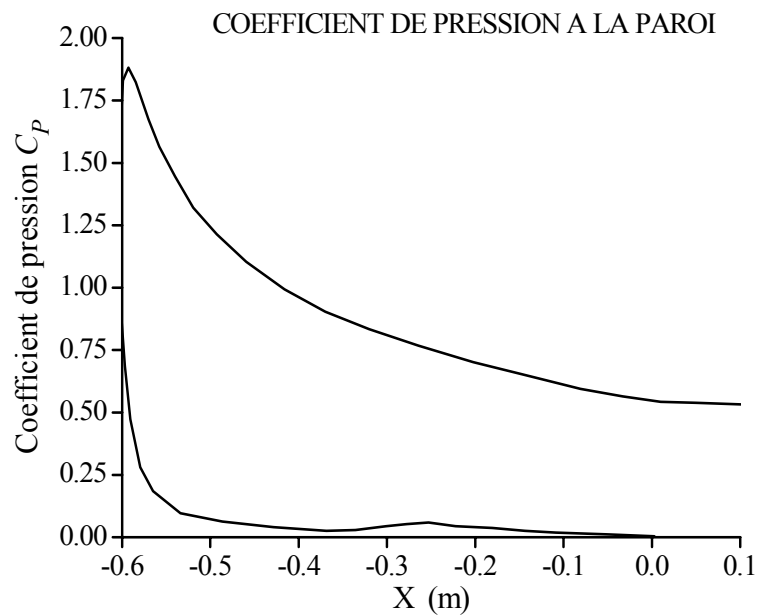


Figure 16.10: Coefficient de pression le long de la paroi de la double ellipse à $M_\infty = 25$

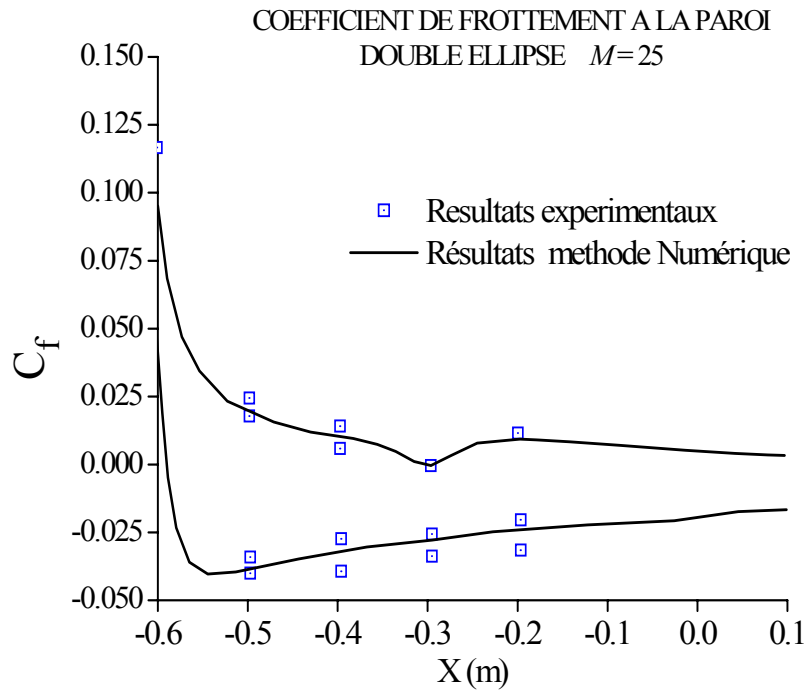


Figure 16.11: Coefficient de frottement le long de la paroi de la double ellipse

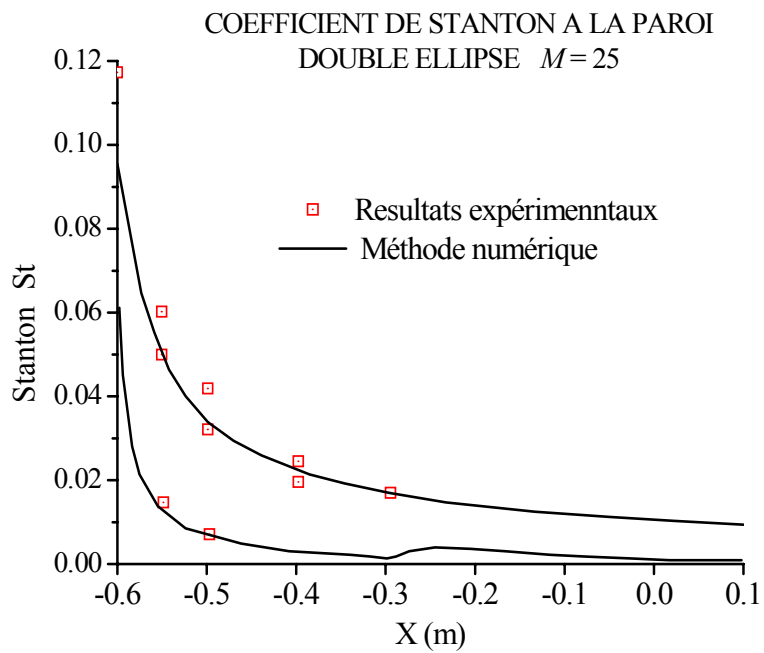


Figure 16. 12: Coefficient de Stanton le long de la paroi de la double ellipse

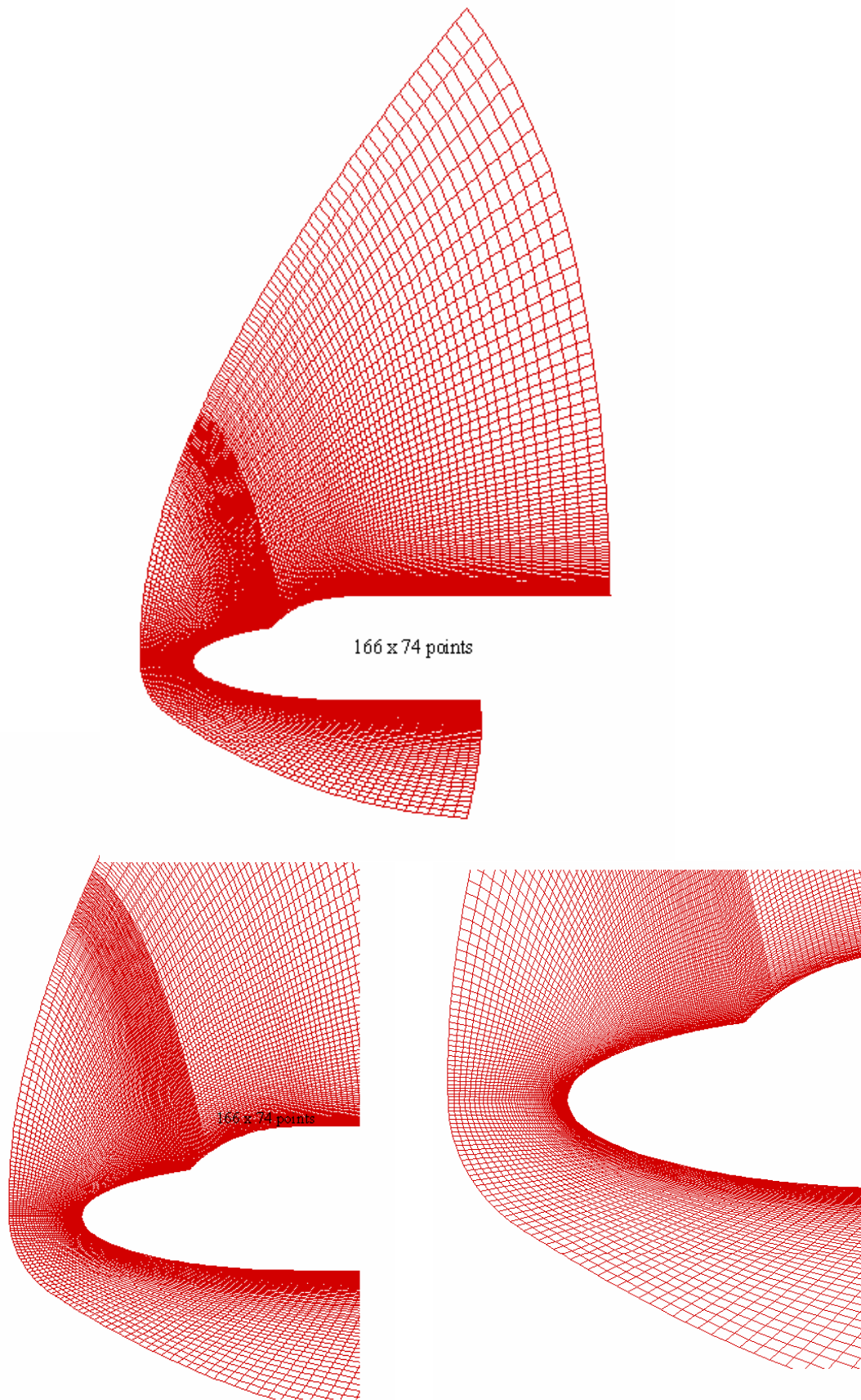


Figure 16.13 : Maillage A sur la double ellipse

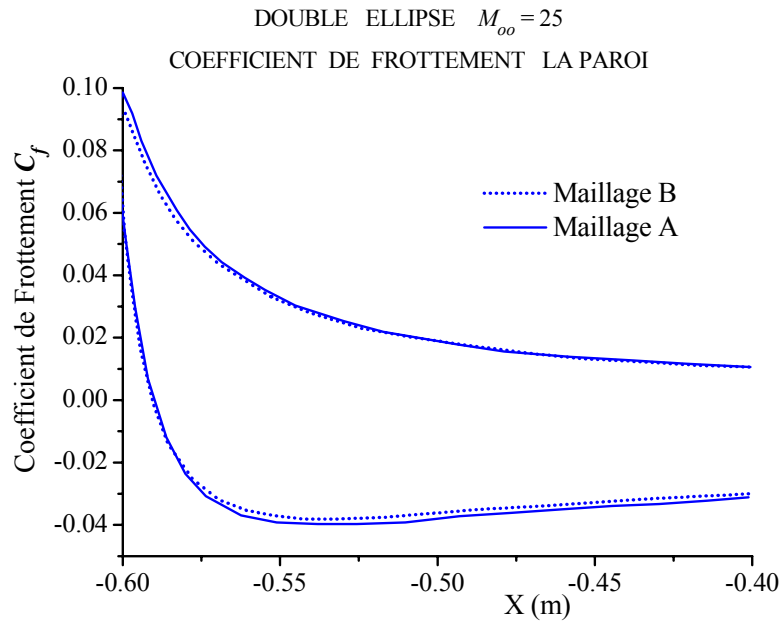


Figure 16. 14 : Comparaison des coefficients de Frottement pariétaux sur la double ellipse

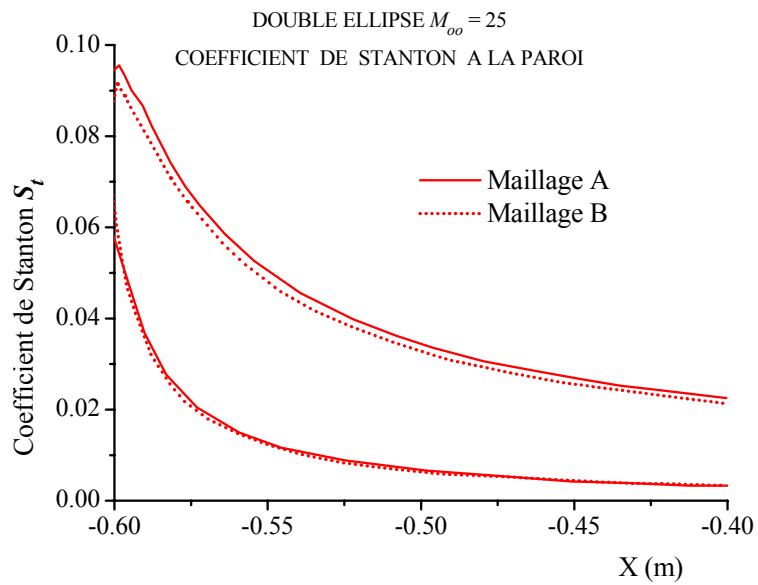


Figure 16. 15 : Comparaison des coefficients de Stanton pariétaux sur la double ellipse

16.2. Ecoulement autour d'une sphère – cylindre

Pour cette géométrie, nous nous sommes intéressée à un cas test pour lequel des comparaisons avec des résultats expérimentaux étaient possibles.

Ce cas concerne une sphère de 6.35 mm de rayon prolongée par un cylindre, placée dans l'air à un nombre de Mach $M_\infty=15.3$. l'expérience a été conduite par Lobb en 1964 [85] : des sphères ont été tirées dans l'air à grande vitesse. Les résultats se présentent sous forme de distance de détachement de l'onde de choc pour différentes conditions de vol. Des simulations numériques ont été effectuées par Candler [26] pour l'air faiblement ionisé en déséquilibre chimique et thermique et par Flament [45] pour de l'air non ionisé en déséquilibre chimique. Flament a considéré les deux hypothèses d'équilibre et de déséquilibre thermique. Nous présenterons sur ce cas test des résultats globaux sur toute la couche de choc.

Les conditions de calcul sont données dans la table 16.3. On obtient avec ces conditions un nombre de Knudsen rapporté au rayon de $1.5 \cdot 10^{-3}$. Les caractéristiques des maillages utilisés sont inspirées du générateur de maillage développé à l'ONERA [65]. Ils sont détaillées dans la Table 16.4. La structure du maillage obtenu est représentée sur la figure 16.16 où l'on n'a figuré qu'un point sur trois :

Tableau 16. 3: Conditions de calcul pour la sphère à $M_\infty=15.3$

Paramètres de calcul		
$M_\infty = 15.3$	$Re/m = 2.3 \cdot 10^6$	$U_\infty = 5280$ m/s
$P_\infty = 664$ Pa	$T_\infty = 293$ °K	$H_\infty = 1.41 \cdot 10^7$ J.Kg ⁻¹
$Le = 1.2$	μ : Wilke, Blottner	λ : Wilke, Eucken
Rayon = 0.0065 m	$T_P = 1000$ °K	Paroi non catalytique

Tableau 16. 4: caractéristiques du maillage pour la sphère à $M_\infty=15.3$

Grid	N_ξ	N_η	$\Delta\eta_1$ (m)	$\Delta\eta_{max}$ (m)	$\frac{\Delta\eta}{\Delta\eta_{max}}$	$\Delta\xi_1$ (m)	r
fine	76	60	$2.2 \cdot 10^{-6}$	$1.3 \cdot 10^{-5}$	$2 \cdot 10^{-1}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-1}$

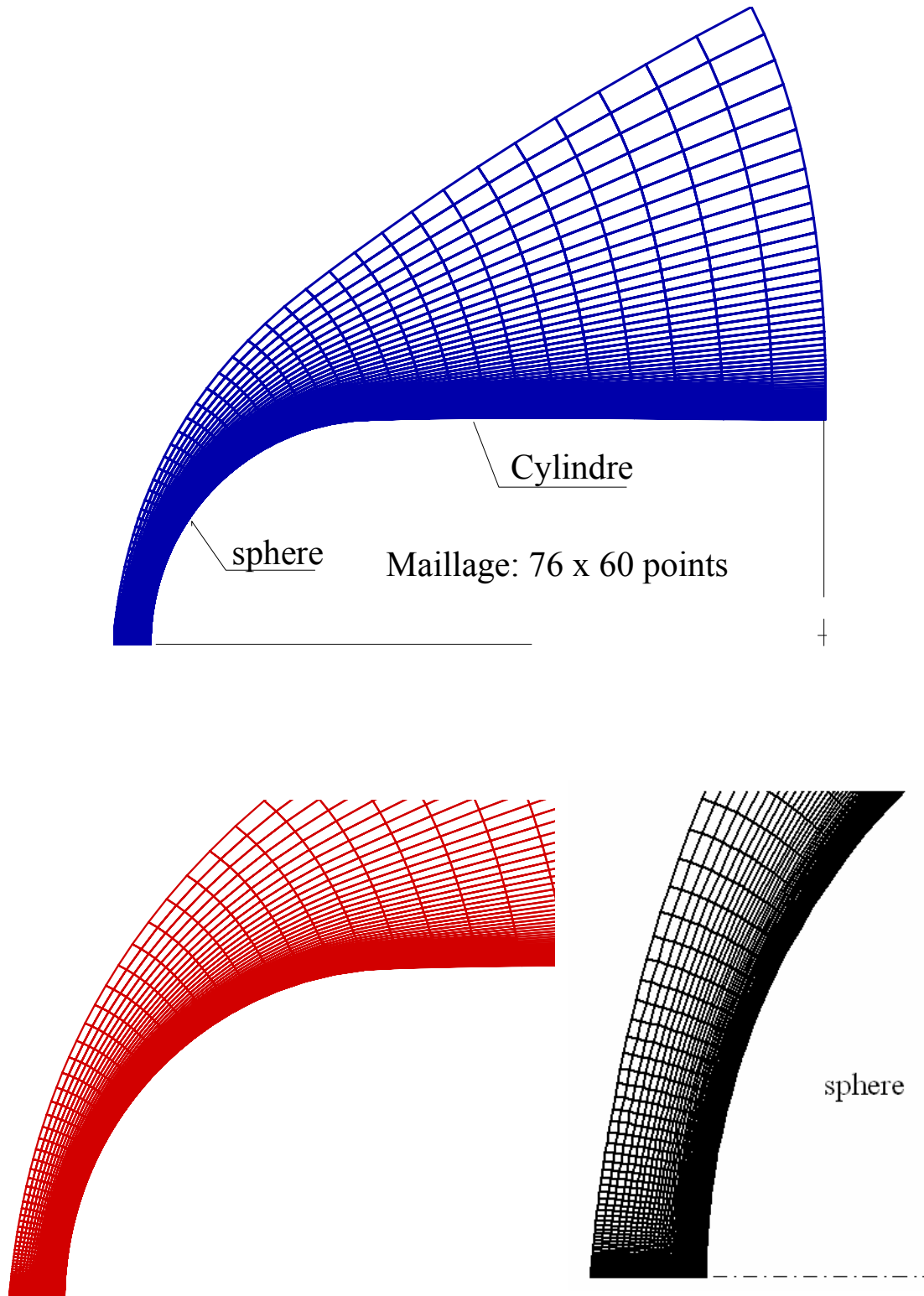


Figure 16.16: structure du maillage (76 x 60 points)

Sur les figures 16.17 à 16.21 sont tracées les iso lignes pour la température, la masse volumique et les différentes fractions massiques. Ces résultats ont été obtenus avec la méthode de Gardiner pour le calcul des taux de productions chimiques.

La comparaison des résultats entre les trois simulations numériques doit tenir compte de la diversité des modèles utilisés. Pour rappel, nous présentons les hypothèses principales effectuées par Flament et Candler dans la table 03.

Tableau 16. 5 : hypothèses principales des modèles utilisés

Auteurs	Etat de l'air	Espèce diatomique	Taux production chimique
Flament	N_2, O_2, N, O, NO NO^+, e	Déséquilibre vibrationnel	Park Déséquilibre thermique
Candler	N_2, O_2, N, O, NO	Oui ou non Déséquilibre vibrationnel	Gardiner

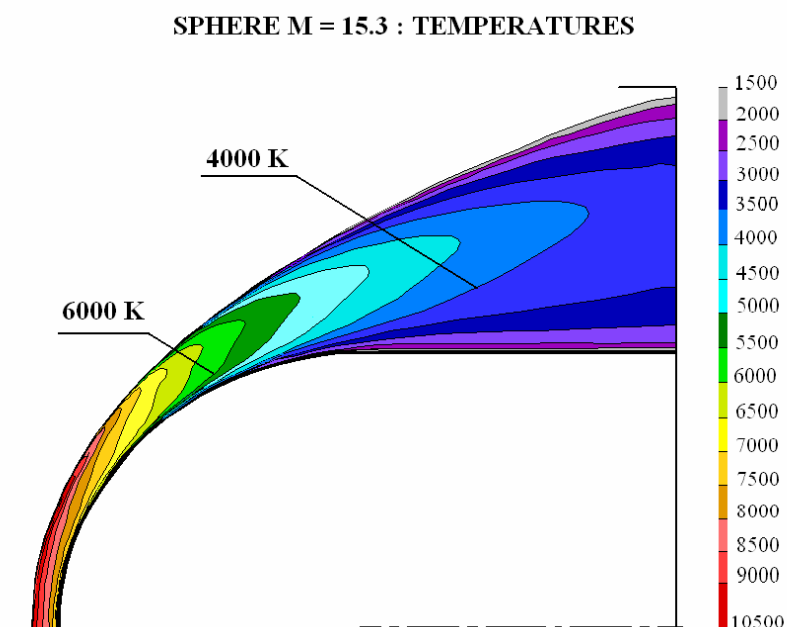


Figure 16. 17 : lignes iso température autour de la sphère à $M_\infty=15.3$

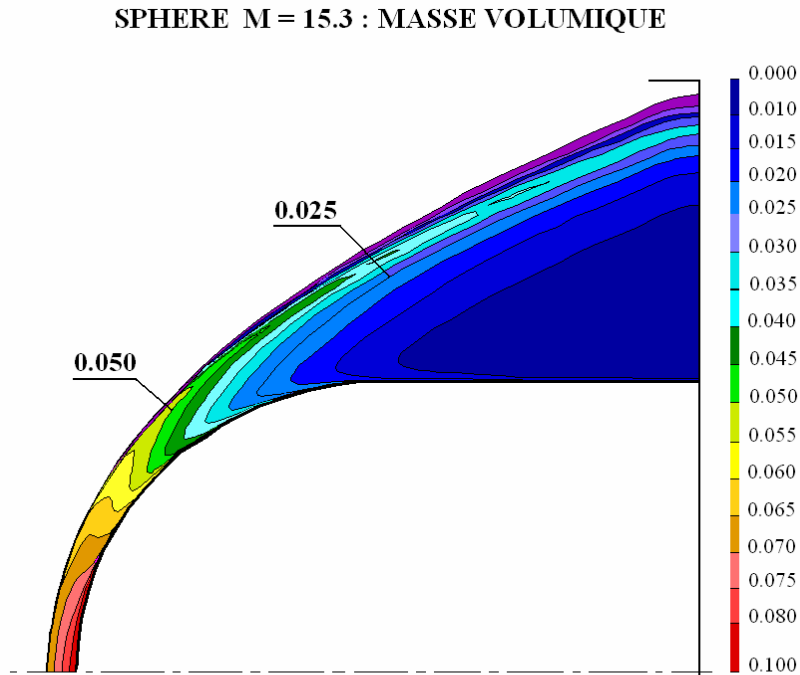


Figure 16. 18: lignes iso masse volumique autour de la sphère à $M_\infty=15.3$

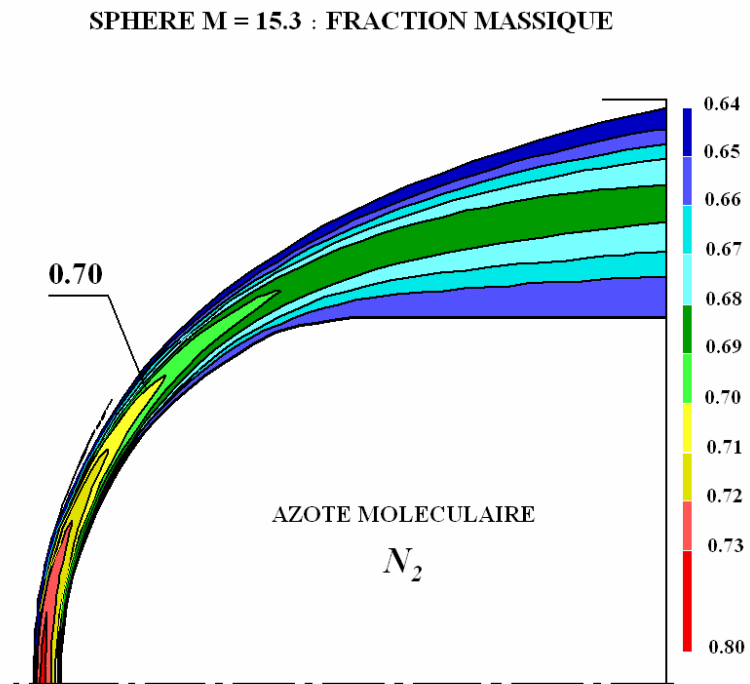


Figure 16. 19: lignes iso fraction massique d'azote autour de la sphère à $M_\infty=15.3$

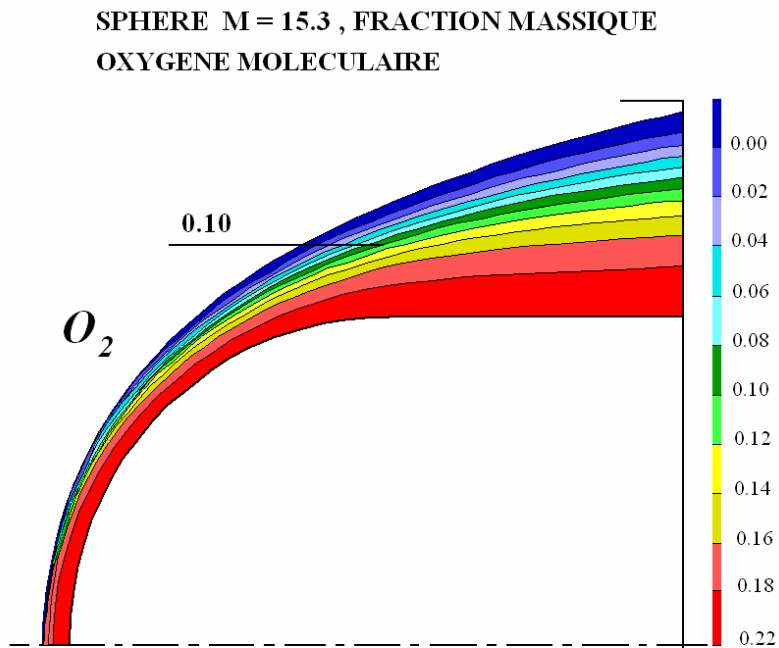


Figure 16. 20: lignes iso fraction massique d'oxygène autour de la sphère à $M_\infty=15.3$

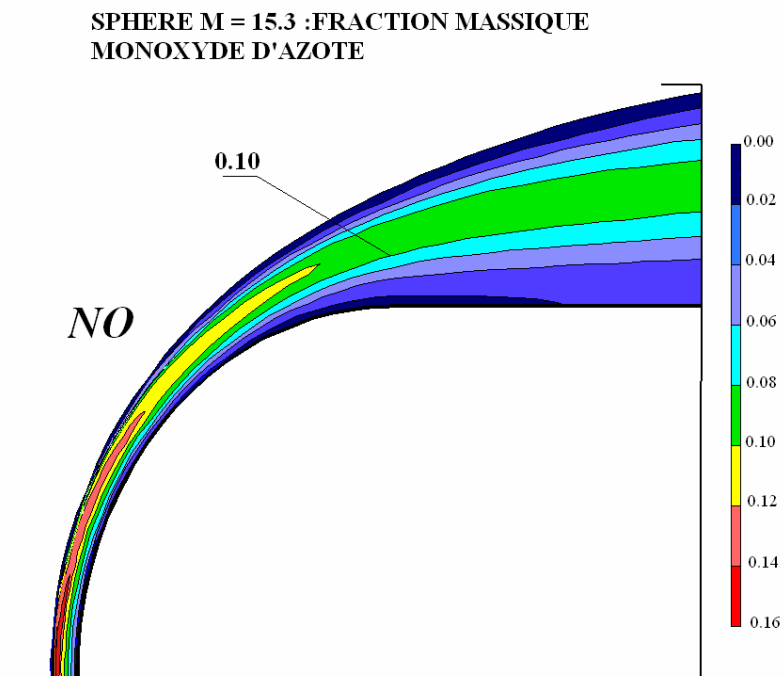


Figure 16. 21 : lignes iso fraction massique de monoxyde d'azote autour de la sphère à $M_\infty=15.3$

Ce récapitulatif montre que lors des comparaisons avec les résultats de Candler, on doit garder à l'esprit l'effet du déséquilibre thermique et de l'ionisation. L'équilibre thermique entraîne évidemment une distribution de température différente. La température intervenant dans le calcul des taux de production chimique étant alors plus élevée, les réactions chimiques sont déclenchées plus rapidement ce qui augmente la masse volumique et diminue par conséquent l'épaisseur de la couche de choc

Cet effet est mis en évidence sur la figure 16.22 où se trouvent comparées les positions de l'onde de choc détachée obtenues d'après la présente méthode, par Candler et Flament en déséquilibre thermique ainsi que par l'expérience [85]. La distance de l'onde de choc a été repérée par le maximum de gradient de masse volumique par analogie avec la méthode utilisée généralement en stioscopie. Les résultats expérimentaux donnent la distance de détachement à 5 à 10 % près. On peut noter sur la figure 16.22 l'accord entre les différents résultats numériques et les résultats expérimentaux, avec dans le cas de l'équilibre thermique, une onde de choc légèrement plus proche de la paroi.

La figure 16.23 donne le profil de température le long de l'axe et la figure 16.24 les profils des fractions massiques. Nous avons porté sur ces figures les résultats obtenus par Flament sous l'hypothèse d'équilibre chimique. La comparaison des résultats est bonne, avec néanmoins quelques différences au voisinage de l'onde de choc détachée. Ces différences peuvent raisonnablement être attribuées aux différences entre les maillages utilisés

Les résultats obtenus par Candler pour les profils ne sont pas indiqués car la modélisation est trop différente de celle choisie ici. En effet, par la prise en compte du déséquilibre thermique et de l'ionisation, l'onde de choc est plus éloignée de la paroi. Ceci affecte les variables dans une grande partie de la couche de choc, les résultats ne devenant similaires qu'au voisinage de la paroi.

Nous avons tracé sur les figures 16.25 à 16.27 les profils des températures et des fractions massiques selon un rayon faisant un angle ϕ égale à 30° et 45° avec l'axe. La température maximale atteinte derrière l'onde de choc décroît et l'intensité des phénomènes de dissociation s'affaiblit lorsqu'on s'éloigne du point d'arrêt. L'oxygène reste cependant toujours complètement dissocié à la paroi tandis que la dissociation de l'azote est moindre.

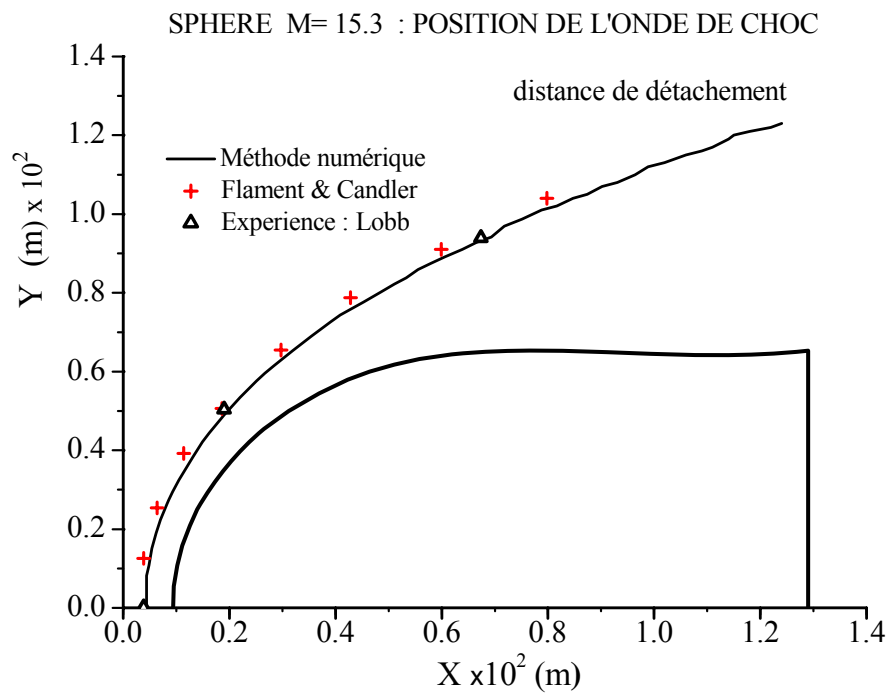


Figure 16. 22 : distance de détachement

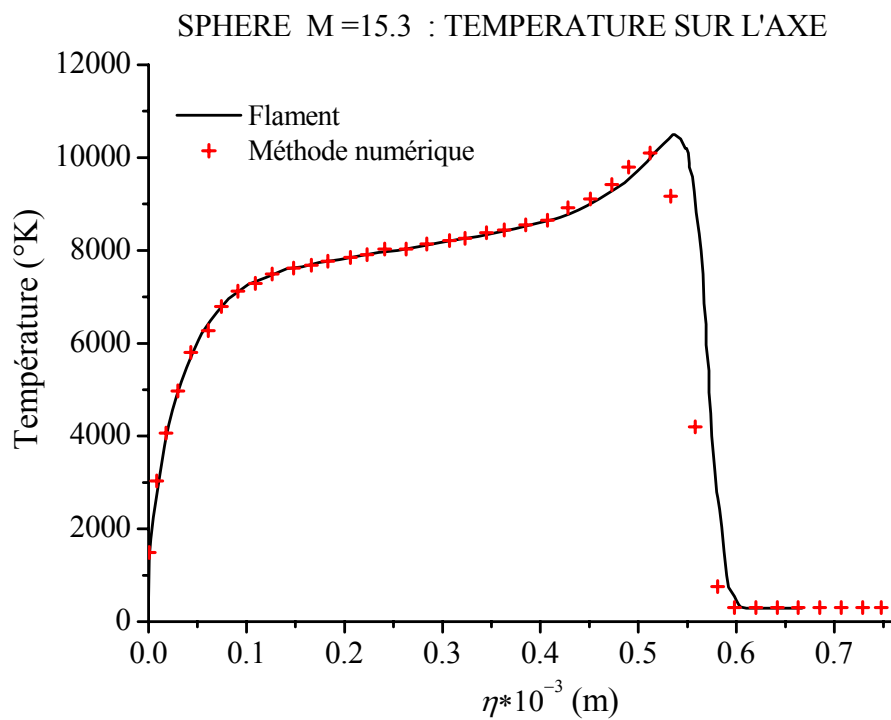


Figure 16. 23 : Profil de température le long de l'axe de la sphère à $M_{\infty}=15.3$

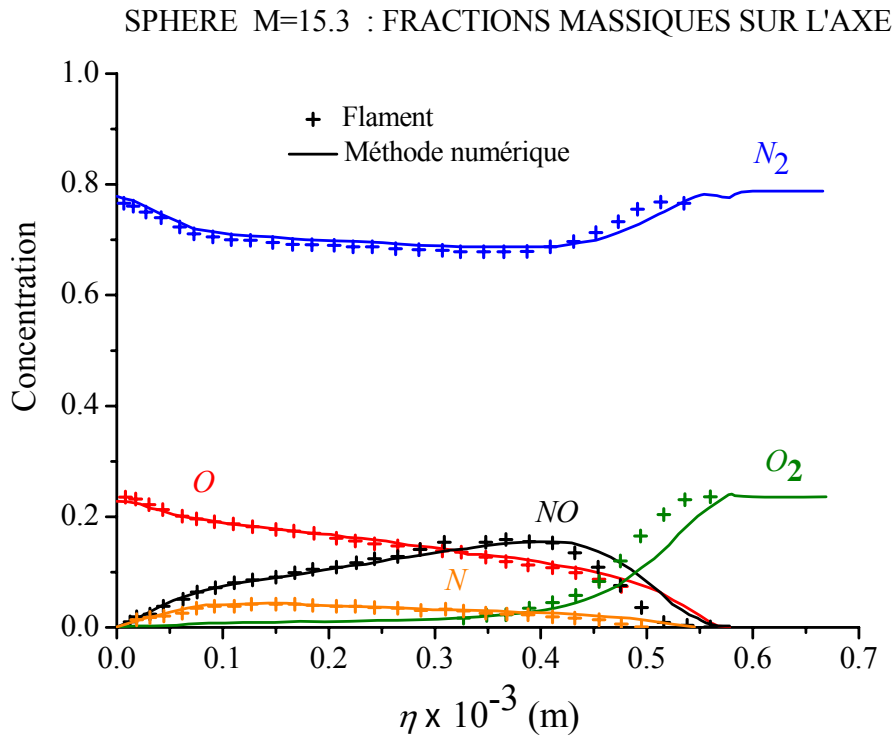


Figure 16. 24: ligne des fractions massiques le long de l'axe de la sphère à $M_\infty=15.3$

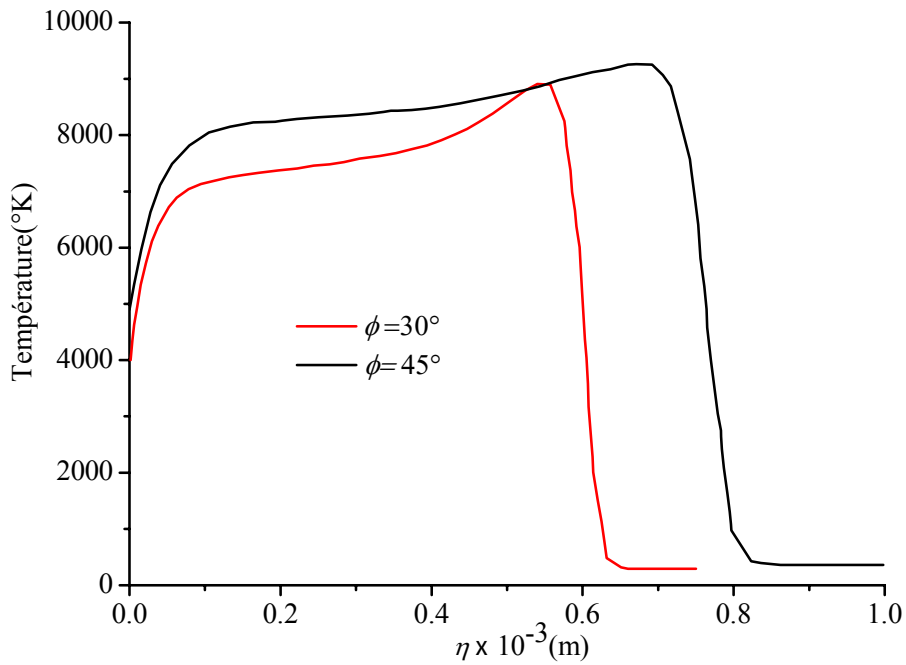


Figure 16. 25 : Profil de température à $\phi = 30^\circ$ et 40° , $M_\infty=15.3$

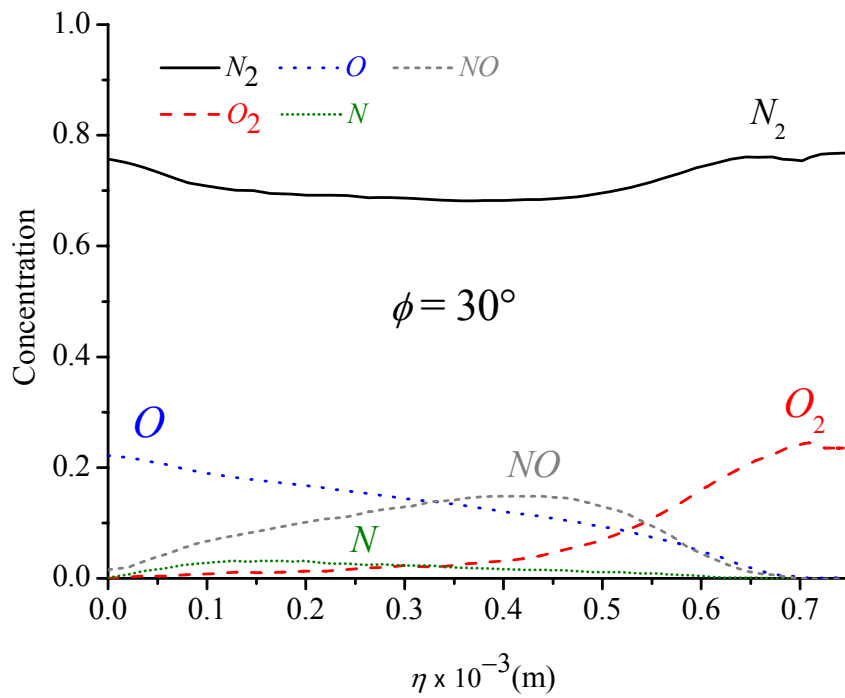


Figure 16. 26 : Profil des fractions massiques à $\phi = 30^\circ$, $M_\infty = 15.3$

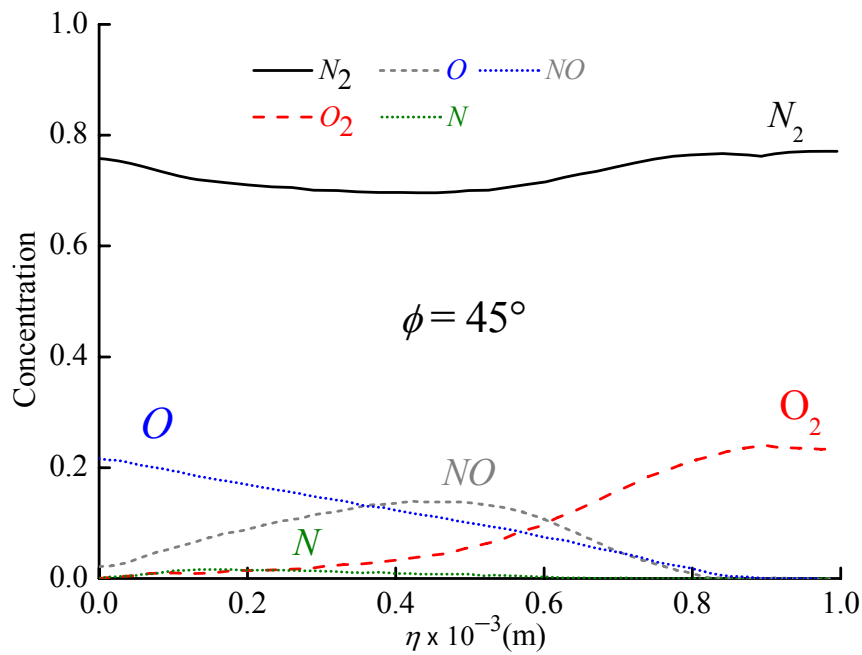


Figure 16. 27 : Profil des fractions massiques à $\phi = 45^\circ$, $M_\infty = 15.3$

16.3. Ecoulement sur une plaque plane

Ce dernier cas test concerne l'étude de la relaxation d'un écoulement réactif sur une plaque plane. L'air est considéré comme un mélange gazeux de cinq gaz parfaits (N_2 , O_2 , N , O , NO) en déséquilibre chimique. Une série de trois jeux de conditions à l'infini amont définissant un écoulement hors équilibre, a été étudiée et les valeurs numériques sont rassemblées dans le tableau 16.6. Ces conditions ne diffèrent que par la pression à l'infini, toutes les autres grandeurs étant constantes. Les différents écoulements sont bien continus, les nombres de Knudsen rapportés à la longueur de la plaque valant respectivement : $3.5 \cdot 10^{-5}$, $3.5 \cdot 10^{-6}$ et $6.5 \cdot 10^{-7}$.

Ces trois cas de simulations permettent de couvrir le domaine des écoulements presque figés au domaine des écoulements en quasi équilibre chimique. En effet, en reprenant les résultats de la section 7.2.1, le temps caractéristique de la convection $t_\infty^* = L^*/U^*$ demeure constant pour la même plaque, si la vitesse reste identique et le temps caractéristique de la production est proportionnel à $1/\rho^*$ à température fixée ($1/t_p^* = (C_M/M_M^*)\rho^* A_c^* T^{*B_c} \exp(-\theta_c^*/T^*)$). Lorsque la pression (et par conséquent la masse volumique) augmente, le temps caractéristique de la production chimique diminue et l'on se rapproche de l'équilibre chimique.

Tableau 16. 6: Conditions de calcul pour une plaque plane

paramètres de Calcul			
$T_\infty = 8000 \text{ °K}$	$U_\infty = 3000 \text{ m s}^{-1}$	$C_{N_{2\infty}} = 0.767$	
$C_{O_{2\infty}} = 0.233$	$C_{NO_\infty} = 0.$	$C_{N_\infty} = 0.$	
$C_{O_\infty} = 0.$	$T_P = 1500 \text{ °K}$	$L_{ref} = 1. \text{ m}$	
	Cas 1	Cas 2	Cas3
P_∞ (Pascal)	10^4	10^3	10^2
$t_{conv}(s)$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$
$t_p(N_2)(s)$	$5.5 \cdot 10^{-3}$	$5.5 \cdot 10^{-2}$	$5.5 \cdot 10^{-1}$
$t_p(O_2)(s)$	$1.6 \cdot 10^{-5}$	$1.6 \cdot 10^{-4}$	$1.6 \cdot 10^{-3}$
$t_{conv}/t_p(O_2)$	22	2.2	0.22

Le même maillage a été utilisé dans les deux premiers cas, un maillage de dimension supérieure a été dessiné pour le troisième cas. Ils sont décrits dans le tableau 16.7, où l'on a conservé les notations du tableau 16.2.

Tableau 16. 7: Caractéristiques des maillages pour la plaque plane

Cas	N_x	N_y	Δy_1 (m)	Δy_{max} (m)	$\frac{\Delta y_1}{\Delta y_{max}}$	Δx_1 (m)	r
1 et 2	80	69	$3 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$
3	80	64	$1.7 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$	10^{-3}	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$7.4 \cdot 10^{-2}$

L'étude de l'écoulement sur une plaque plane comprend deux parties :

- La première partie est consacrée à l'analyse de la relaxation le long de la plaque à l'aide d'une méthode simplifiée pour le calcul d'un écoulement monodimensionnel réactif et non visqueux. Par ailleurs, cette méthode a permis la validation des résultats du code de Navier – Stokes pour les écoulements à l'extérieur à la couche limite.
- La deuxième partie concerne la présentation des résultats dans la couche limite et leur comparaison avec les résultats obtenus par Eldem [42]

16.3.1. Etude de la relaxation le long de la plaque

Cette étude a été réalisée à l'aide d'une méthode simplifiée pour le calcul d'un écoulement monodimensionnel réactif et non visqueux, présenté ci – dessous.

Description des équations étudiées

Pour un fluide non visqueux, réactif, en écoulement stationnaire monodimensionnel, on peut écrire le système suivant, formé à partir des équations d'Euler :

$$\frac{\partial(\rho_I u)}{\partial x} = \omega_I \quad I = 1, ns - 1 \quad (16.2)$$

$$(\rho u) = \rho_\infty u_\infty \quad (16.3)$$

$$P + (\rho_\infty u_\infty)u = P_\infty + \rho_\infty u_\infty^2 \quad (16.4)$$

$$h(T) + \frac{1}{2}u^2 = h_\infty + \frac{1}{2}u_\infty^2 \quad (16.5)$$

L'équation d'état du système est donnée par :

$$P = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I \frac{R}{M_I} T \quad (16.6)$$

Ce système d'équation a été résolu à l'aide d'une marche en espace, explicite. En utilisant des notations évidentes, l'équation (1) est discrétisé suivant :

$$(\rho_I u)_{i+1} = (\omega_I)_i \Delta x + (\rho_I u)_i, \quad I = 1, ns - 1 \quad (16.7)$$

On en déduit ensuite pour les fractions massiques :

$$(C_I)_{i+1} = \frac{(\rho_I u)_{i+1}}{(\rho u)_{i+1}} = \frac{(\rho_I u)_{i+1}}{\rho_\infty u_\infty}, \quad I = 1, ns - 1 \quad (16.8)$$

$$(C_{ns})_{i+1} = 1 - \sum_{I=1}^{ns-1} (C_I)_{i+1}$$

Les fractions massiques étant déterminées aux points d'indice $(i+1)$, on résout ensuite le système d'équations couplées (16.4), (16.5) et (16.6) en utilisant les valeurs les plus récentes des fractions massiques. Tout d'abord, l'équation d'état (16.6) permet d'éliminer la pression intervenant dans l'équation (16.4) au profit de la température. On obtient ainsi un système de deux équations à deux inconnues $(T_{i+1}$ et $u_{i+1})$ que l'on résout par une méthode de Newton.

Résultats

Les valeurs numériques des données d'entrée utilisées dans le code de calcul sont, d'une part les valeurs des fractions massiques et des pressions données dans le tableau 16.6 et d'autre part, l'enthalpie totale $H = 1.44454 \cdot 10^7 \text{ J Kg}^{-1}$ et la masse volumique totale $\rho = 4.3359 \cdot 10^{-3} \text{ Kg m}^{-3}$ pour $P = 10^4 \text{ Pa}$. Les masses volumiques pour les cas 2 et 3 se déduisent de façon systématique et immédiate.

L'écoulement en entrée de la plaque est en déséquilibre chimique et sera, donc le siège d'une relaxation vers l'équilibre chimique le long de la plaque. Comme nous l'avons souligné dans l'introduction de cette étude, suivant le temps caractéristique de la production chimique, la distance de relaxation vers cet état d'équilibre sera plus ou moins longue. Rappelons simplement que la pression en entrée de la plaque commande cette distance caractéristique, en effet, une augmentation de pression entraîne une relaxation plus rapide.

Les figures 16.28 à (16.30) donnent l'évolution des pressions, température et vitesse le long de la plaque. On retrouve le comportement attendu, à savoir une variation très rapide des grandeurs en début de la plaque dans le cas 1 amenant les variables à des valeurs quasi-constantes, ensuite le long de la plaque. Dans le cas 3 en revanche, l'évolution des variables est plus lente et la valeur d'équilibre n'est pas atteinte en bout de plaque.

A l'entrée de la plaque, l'écoulement est non dissocié (composé d'azote et d'oxygène moléculaires) et la température est de 8000 °K : la température est trop forte pour que les molécules soient stables et des phénomènes de dissociation endothermique apparaissent instantanément. La température diminue alors le long de la plaque tandis que la vitesse augmente (équation (16.5)) et que la pression décroît (équation (16.4)).

Les profils de fraction massique sont représentés sur les figures (16.31) à (16.35). Dans le cas 1, l'azote et l'oxygène sont rapidement dissociés, ce qui conduit non seulement à la formation d'azote et d'oxygène atomique mais aussi de monoxyde d'azote. Ensuite, le monoxyde d'azote devient instable et se transforme en azote moléculaire par l'intermédiaire des réactions d'échange. Dans les deux autres cas, la dissociation étant progressive, la température reste comparativement plus élevée et la

formation de monoxyde d'azote est régulière. Le cas 3 enfin, ne correspond pas exactement à un écoulement dit figé mais les variations des fractions massiques sont lentes.

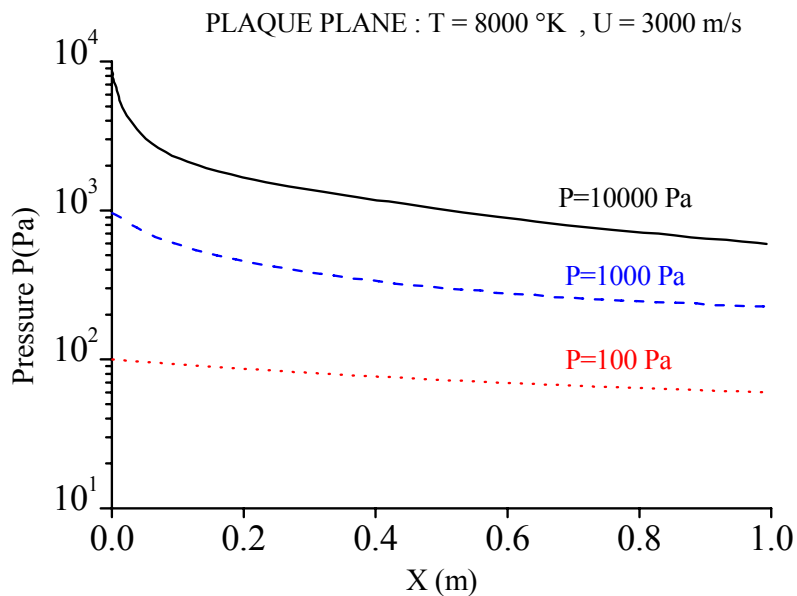


Figure 16. 28 : Pression le long de la plaque

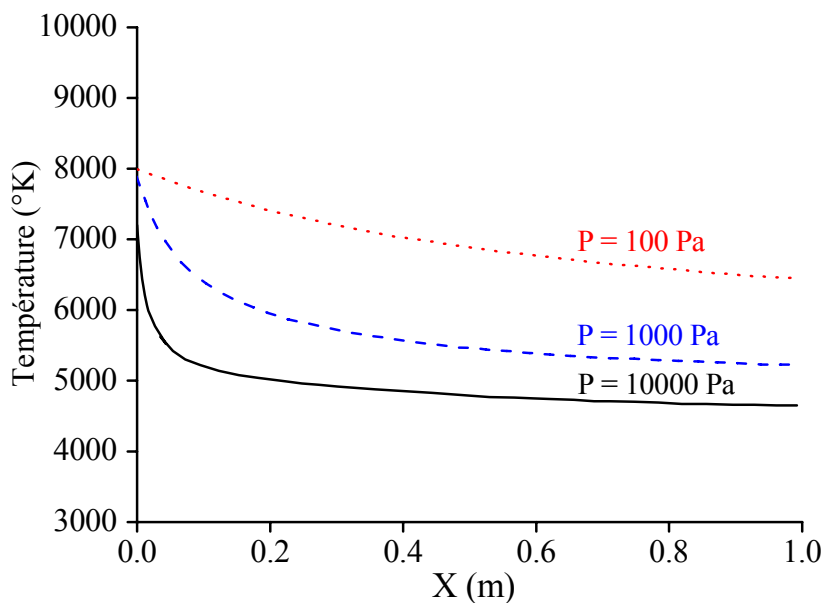


Figure 16. 29 : Température le long de la plaque

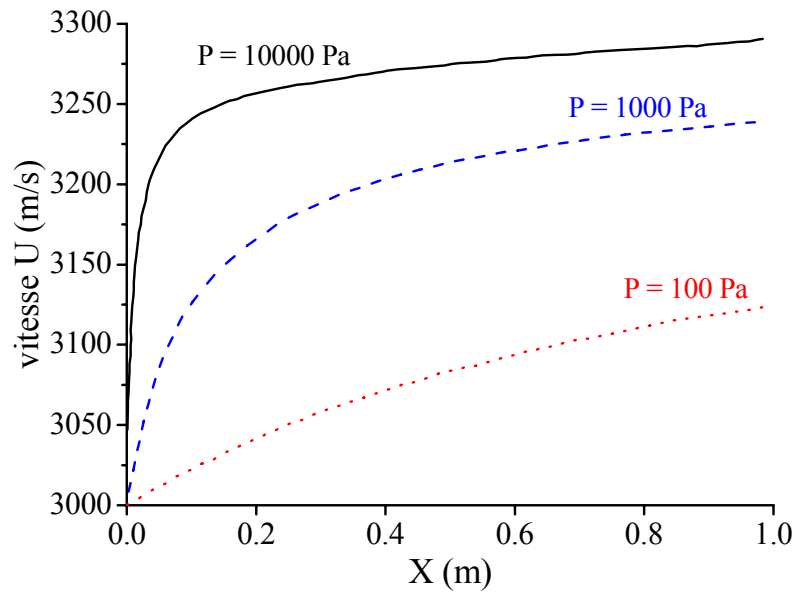


Figure 16. 30 : Vitesse le long de la plaque

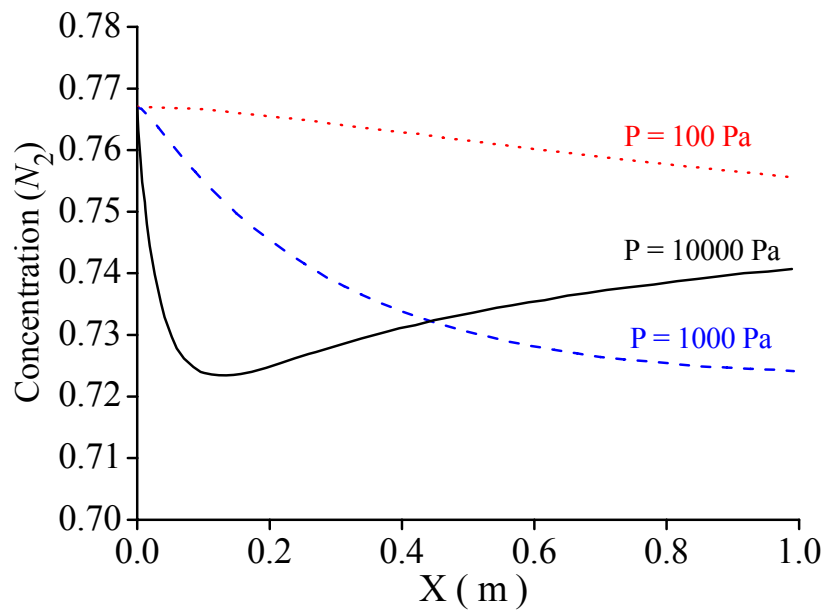


Figure 16. 31 : Fraction massique d'azote moléculaire le long de la plaque

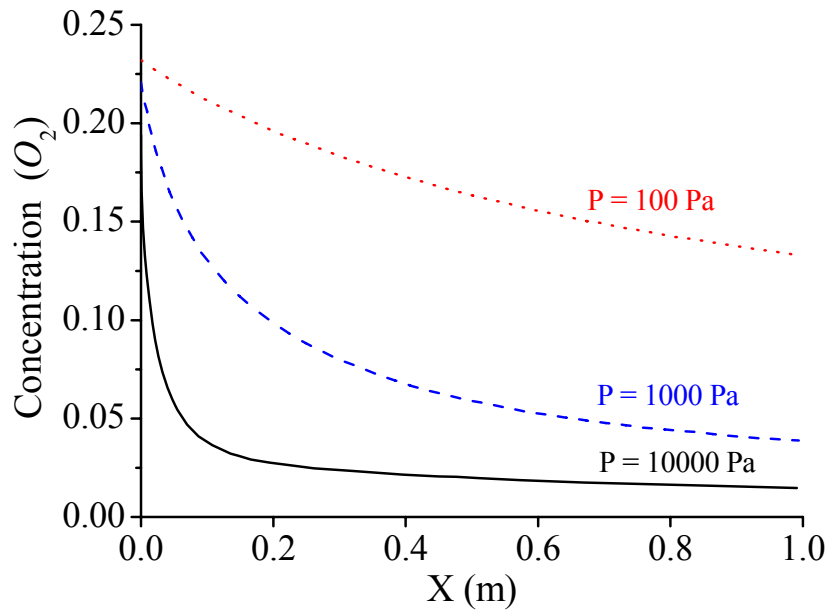


Figure 16. 32 : Fraction massique de l'oxygène moléculaire le long de la plaque

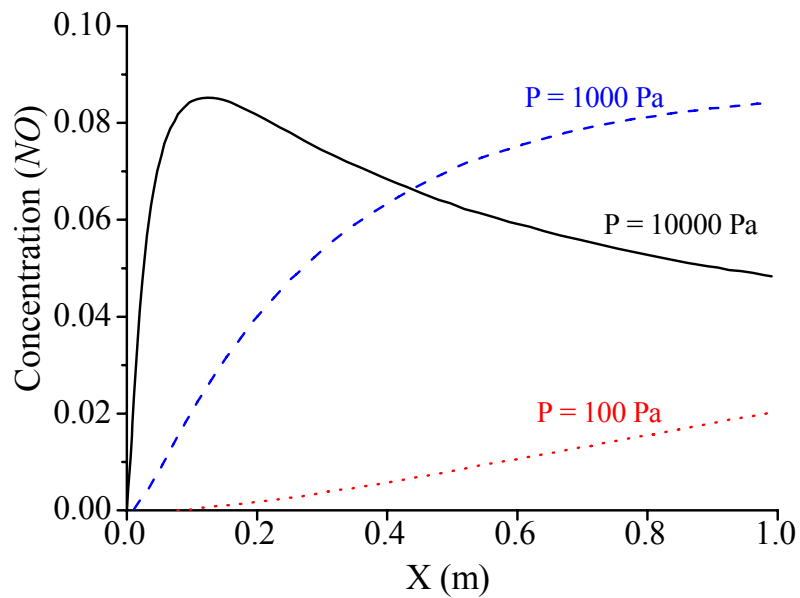


Figure 16. 33 : Fraction massique du monoxyde d'azote le long de la plaque

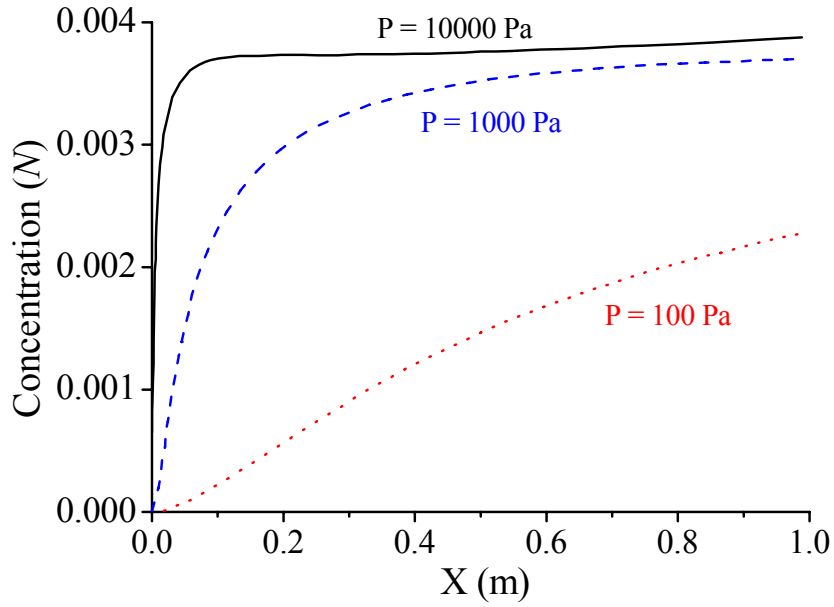


Figure 16.34 : Fraction massique d'azote atomique le long de la plaque

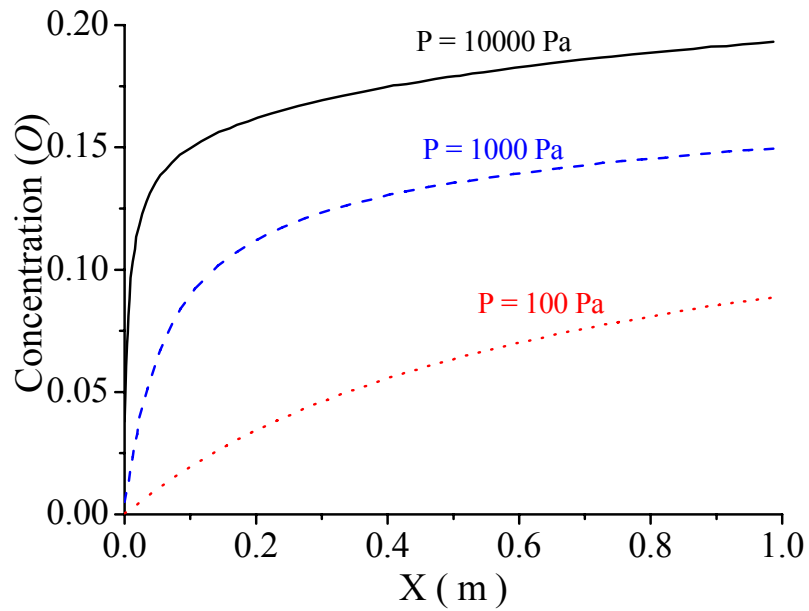


Figure 16.35 : Fraction massique d'azote atomique le long de la plaque

16.3.2. Etude de la couche limite

A chacun de ces trois cas tests correspond un nombre de Reynolds à l'entrée de la plaque différent, dictée par la masses volumique, rapportée à la longueur de la plaque , on obtient : $Re = 70000$ dans le cas 1 et $Re = 7000$ te 700 dans les cas respectivement 2 et 3.

La configuration simple de la plaque autorise des comparaisons avec des résultats obtenus par le code de couche limite au premier ordre de Eldem [42] . Pour une comparaison complète, les relations de fermeture pour l'équation d'état, les coefficients de transport et les vitesses de réaction directe sont identiques avec celles de Eldem.

Pour les trois cas, nous avons tracé les profils de température à deux abscisses différentes $x = 0.1$ m et $x = 0.8$ m (voir figure 16.36 à 16.41). Les résultats obtenus avec les deux codes de calcul se superposent parfaitement dans la couche limite. On peut par ailleurs noter, sur les profils de température à $x = 0.1$ m dans le cas 3, que le code de calcul Navier –Stokes indique un échauffement à l'extérieur de la couche limite . On peut l'expliquer par la présence d'une onde de choc induit par la couche limite qui provoque une compression (et donc un échauffement) du fluide. Cet effet n'est visible que dans le cas 3 qui correspond à une épaisseur de couche limite plus importante et par conséquent à une déviation de fluide plus notable.

La comparaison des fractions massiques (figures 16.42 à 16.47) est bonne tant que le déséquilibre est faible. Cependant, dans le cas 1 (ou le cas 2 à $x = 0.8$ m), elle est moins bonne, les fractions massiques à l'extérieur étant différentes : la dissociation de l'azote et de l'oxygène est plus marquée pour les résultats de note code numérique qui donnent aussi plus de monoxyde d'azote.

En effet, pour le code de couche limite, un système d'équation analogue à celui que nous avons résolu pour l'étude de la relaxation, est utilisé pour déterminer les conditions à la frontière de la couche limite. Les fractions massiques sont notamment obtenues par intégration de l'équation (16.2) à partir de la valeur initiale en debout de plaque. Cependant les conditions d'entrée étant supersonique, une onde de choc, de faible amplitude, prend naissance à la rencontre de l'écoulement d'entrée et de la couche limite. Les lignes de courant alimentant l'extérieur de la couche limite ont donc suivi une évolution différente de celle prise en considération par le code Eldem. Les conditions extérieures sont donc légèrement différentes pour les deux codes, ce qui se traduit d'une manière claire sur les fractions massiques qui sont des variables plus sensibles au changement.

Enfin, les flux de chaleur pariétaux sont donnés sur la figure 16.48. L'accord entre les résultats donnés par notre code et ceux obtenus par le code de couche limite au premier ordre de Eldem est très bon.

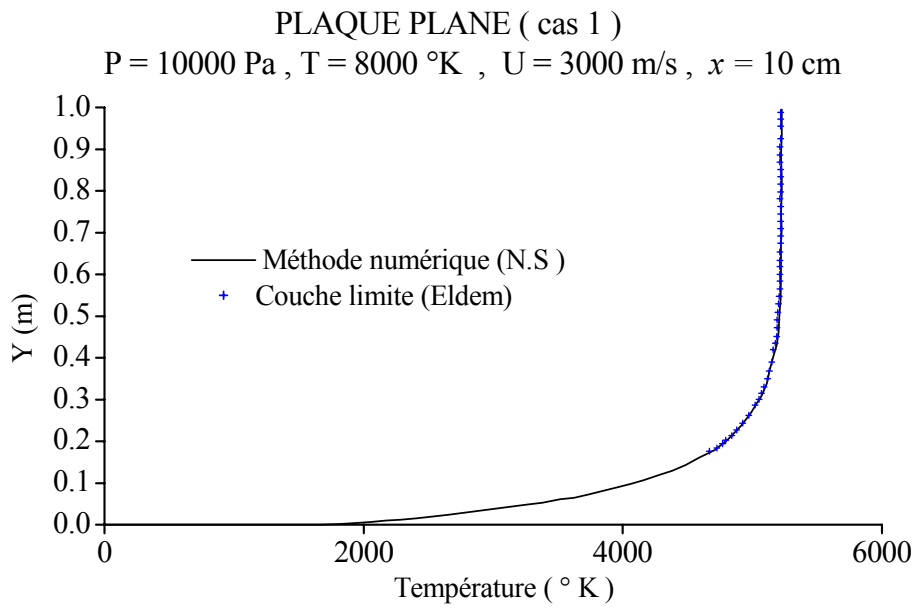


Figure 16. 36 : Profil de température à $x = 0.1 \text{ m}$, cas 1

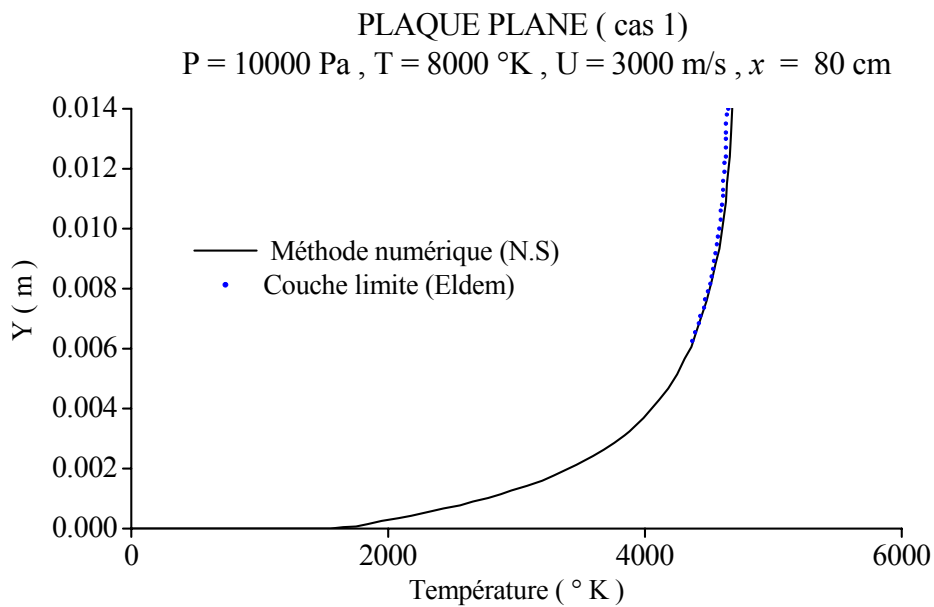


Figure 16. 37 : Profil de température à $x = 0.8 \text{ m}$, cas 1

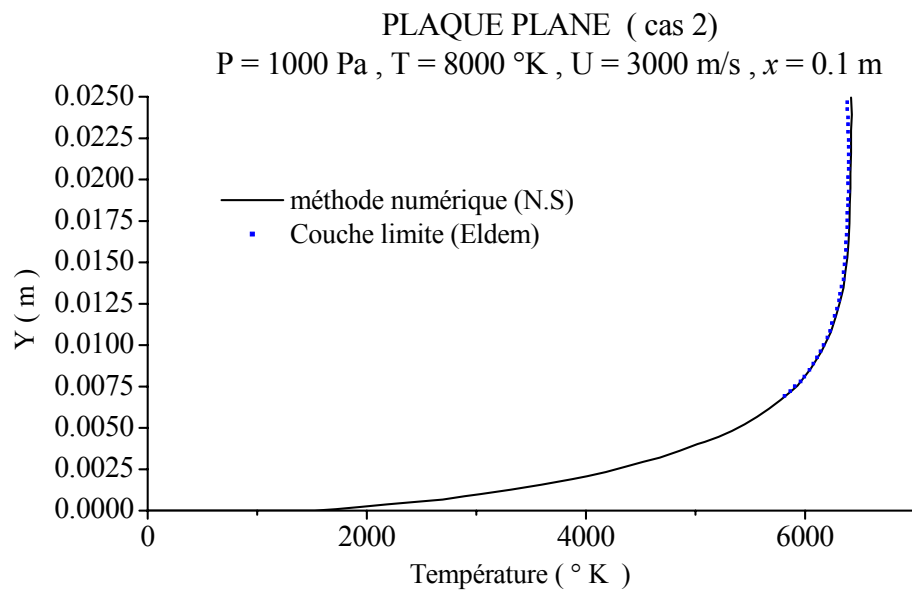


Figure 16. 38: Profil de température à $x = 0.1$ m , cas 2

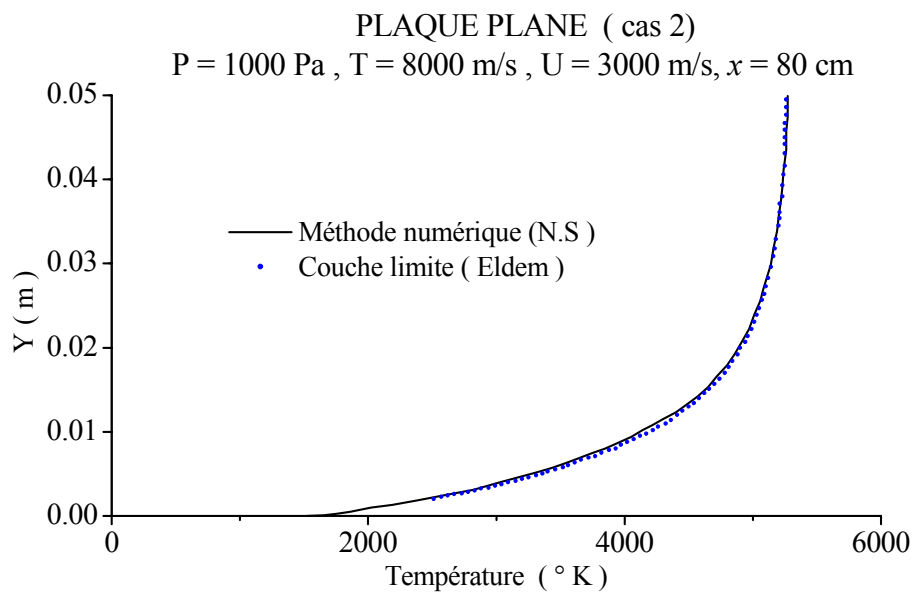


Figure 16. 39 : Profil de température à $x = 0.8$ m, cas 2

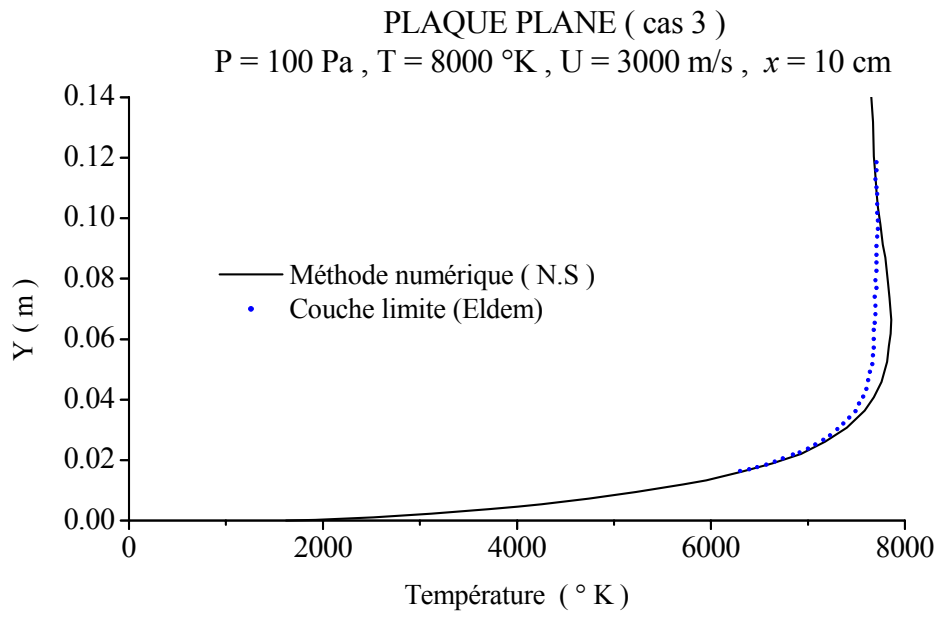


Figure 16. 40 : Profil de température à $x = 0.1 \text{ m}$, cas 3

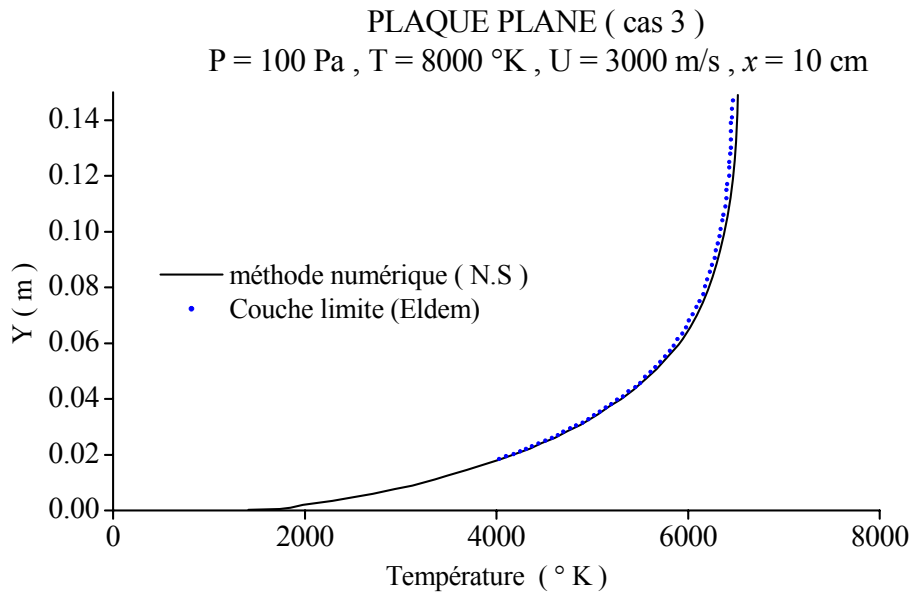


Figure 16. 41 : Profil de température à $x = 0.8 \text{ m}$, cas 3

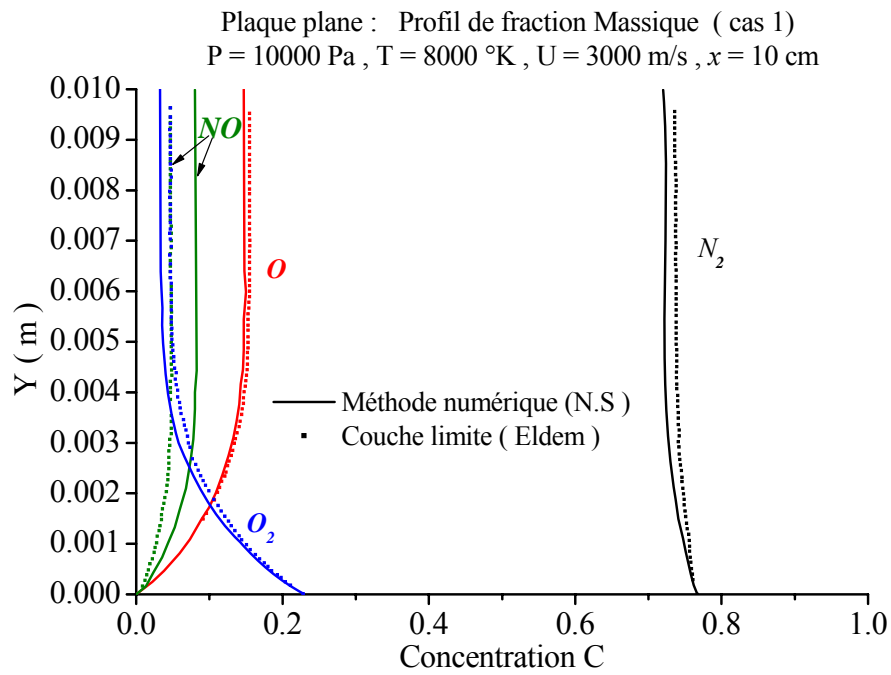


Figure 16. 42 : Profil de fraction massique à $x = 0.1 \text{ m}$, cas 1

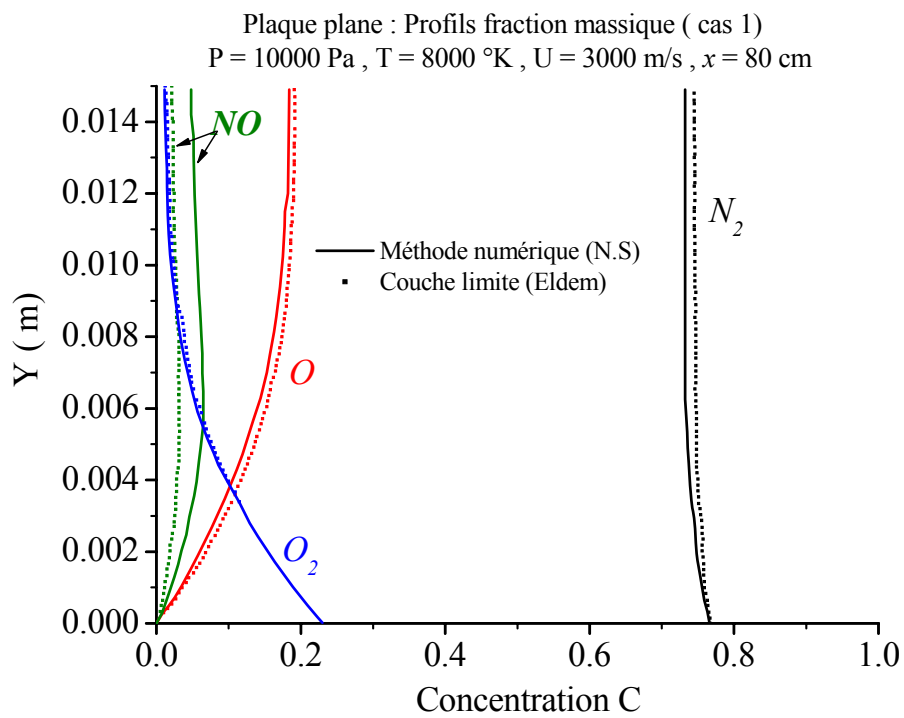


Figure 16. 43 : Profil de fraction massique à $x = 0.8 \text{ m}$, cas 1

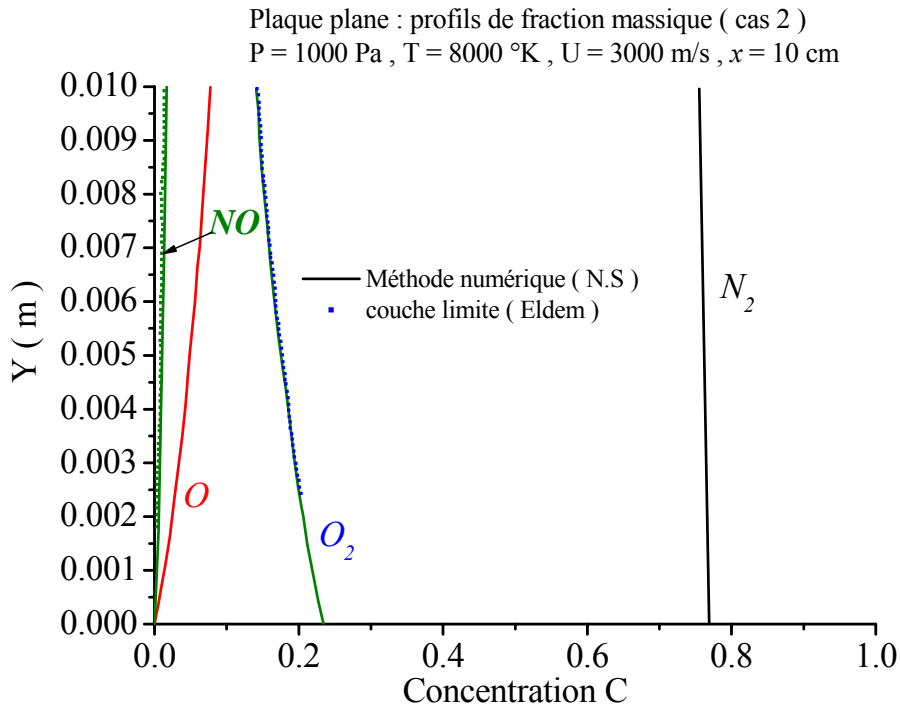


Figure 16. 44 : Profil de fraction massique à $x = 0.1$ m, cas 2

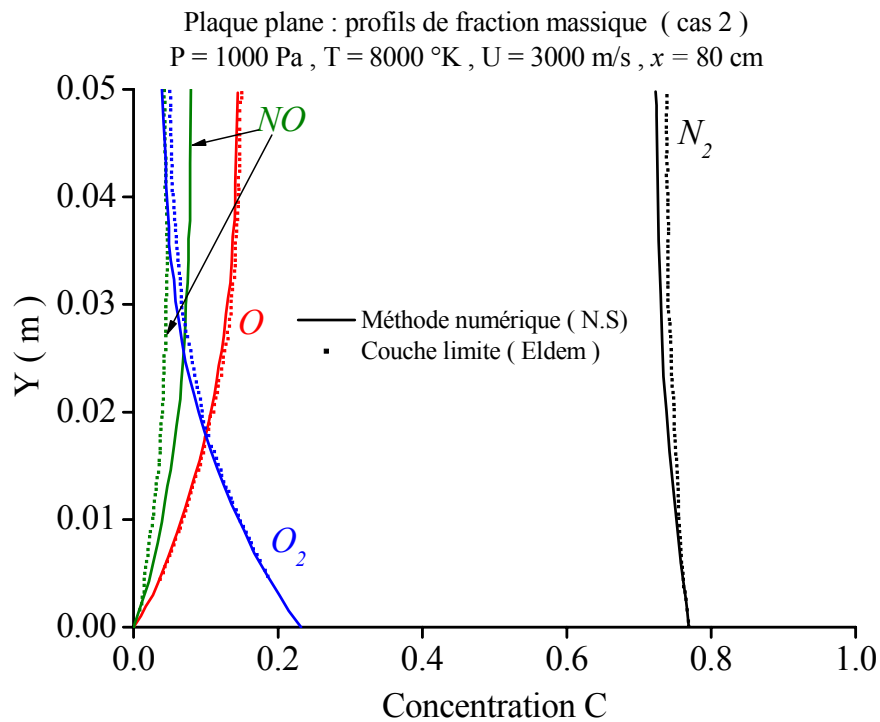


Figure 16. 45 : Profil de fraction massique à $x = 0.8$ m, cas 2

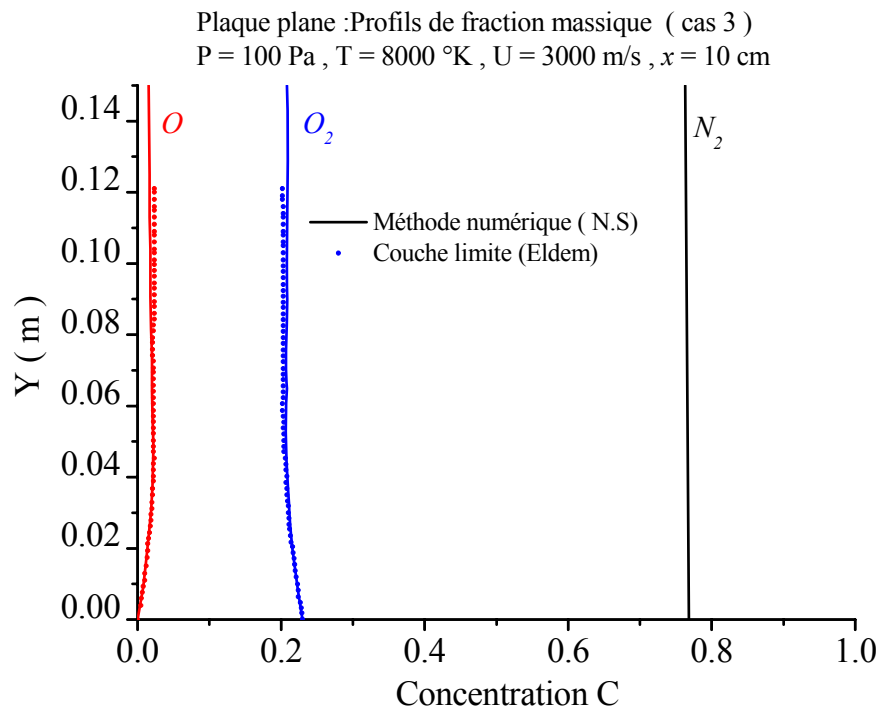


Figure 16. 46 : Profil de fraction massique à $x = 0.1 \text{ m}$, cas 3

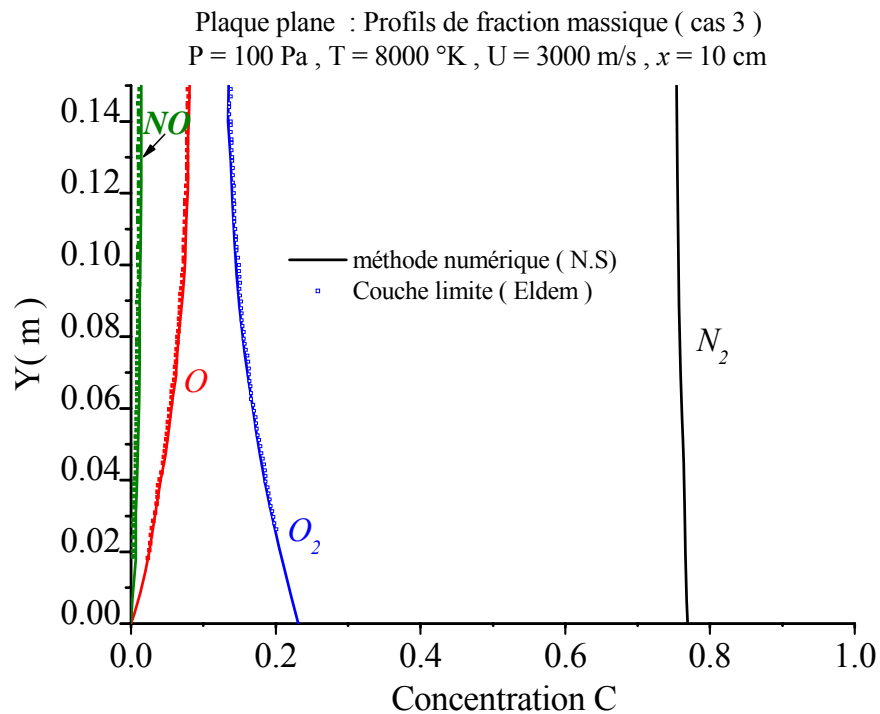


Figure 16. 47 : Profil de fraction massique à $x = 0.8 \text{ m}$, cas 3

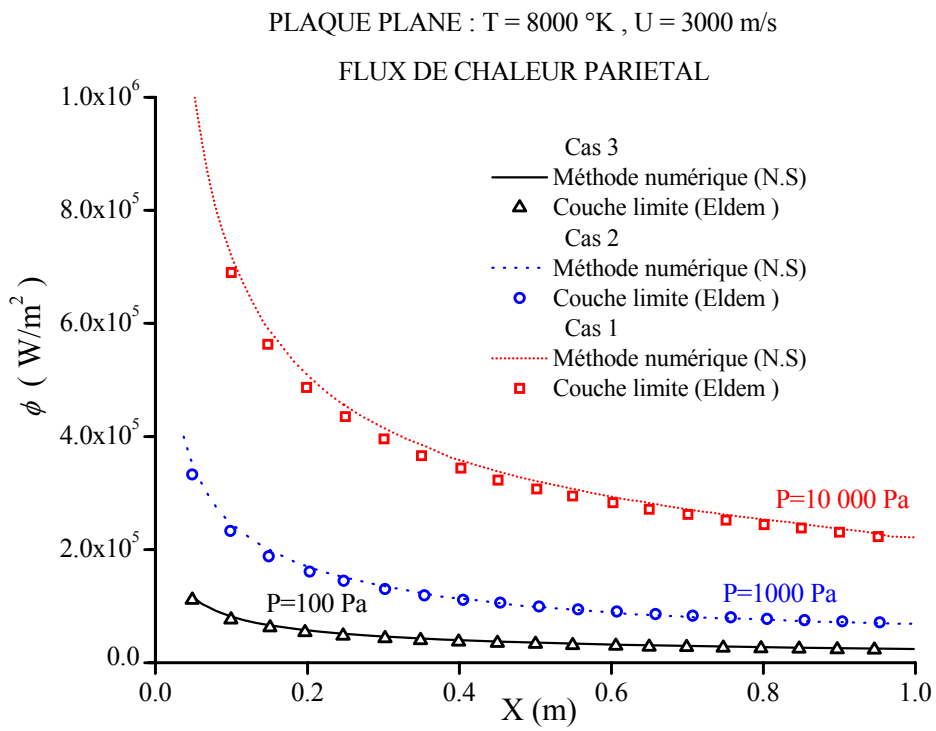


Figure 16. 48 : Flux de chaleur à la paroi ; Cas 1 , 2 et 3

Chapitre 17

17. Ecoulement autour d'un hyperboloïde

L'étude des écoulements autour d'hyperboloïdes est motivée par le concept de 'corps axisymétrique équivalent' : des essais conduits à la NASA ont montré qu'il est possible de calculer de manière réaliste l'écoulement sur la ligne de symétrie intrados de la navette spatiale en effectuant un calcul sur un corps axisymétrique équivalent. Le dessous de la navette est quasiment plat ; la ligne de symétrie peut être approché par un arc d'hyperbole ayant le même de courbure au voisinage du point d'arrêt et une asymptote correspondant à la partie arrière plate de l'intrados. Ainsi, le calcul est reporté sur une hyperboloïde de révolution à incidence nulle [118]. Le corps axisymétrique obtenu représente correctement, la distribution longitudinale de pression mais n'est pas capable de représenter l'effet tridimensionnel de divergence des lignes de courant.

Cependant, cette méthode d'hyperboloïde équivalent nous a permis d'obtenir les données concernant le corps et la pression d'une façon simple et rapide et de porter notre attention sur l'étude paramétrique des effets de gaz réel pour des conditions de vol réalistes.

Les caractéristiques géométriques (rayon de courbure au nez et angle des asymptotes) de cet hyperboloïde équivalent dépendent des conditions locales de l'écoulement durant la trajectoire de rentrée (figure 17.1). Ces dernières sont calculées en fonction de l'angle d'incidence de l'engin et le rayon de courbure local de la région du point d'arrêt.

Nous avons utilisé les données du deuxième vol de la navette américaine. Les mesures sur la navette sont effectuées à partir d'une altitude d'environ 120 km (400 000ft) [132]. Les grandeurs caractéristiques, les conditions atmosphériques, les conditions de vol, le rayon du nez et l'angle d'asymptote de l'hyperboloïde équivalent sont tabulés pour toute rentrée (voir annexe A)

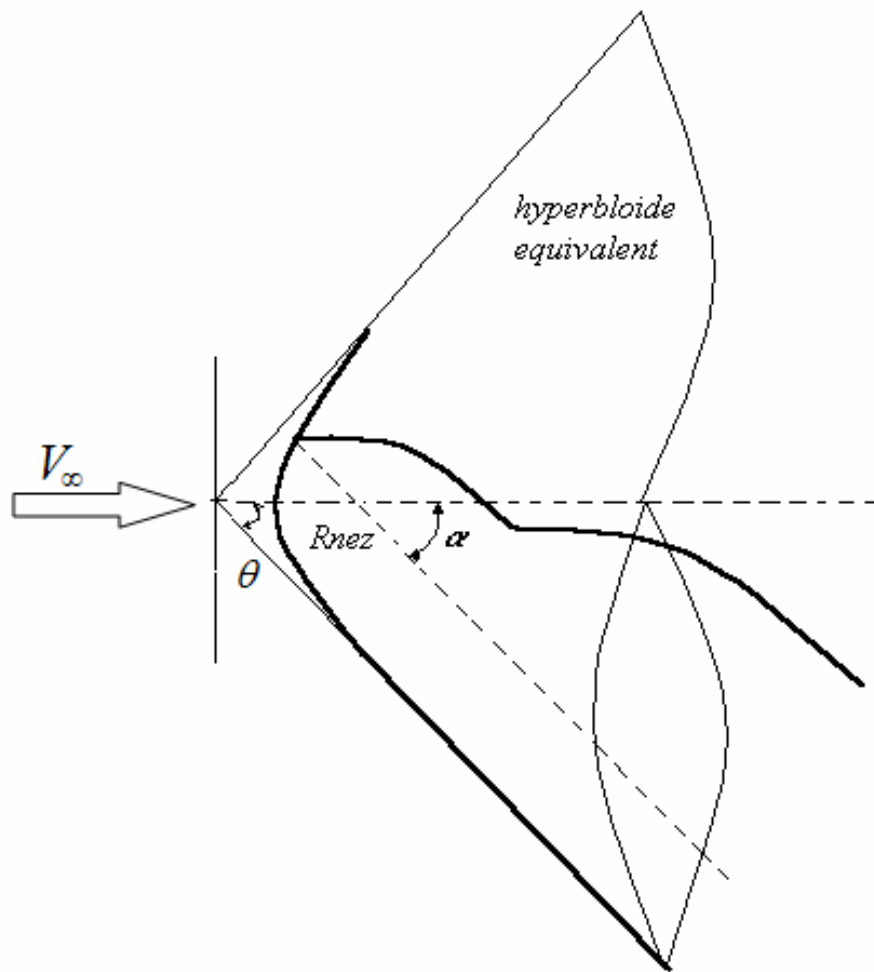


Figure 17. 1 : Configuration Hyperboloïde

Etude paramétrique

Dans la majeure partie d'un vol hypersonique (figure 17.2), bien que la vitesse soit importante, le nombre de Reynolds reste modéré car la pression est faible ; l'écoulement est alors laminaire. Le régime turbulent apparaît à partir de 47 Km environ, à des nombres de Mach de l'ordre de 9. D'autre part, à cause des pressions et des masses volumiques nettement plus élevées et des mouvements de brassage de la turbulence aux altitudes plus basses que 47 Km, le mélange se retrouve beaucoup plus rapidement en équilibre. L'étude paramétrique en déséquilibre chimique a été menée uniquement pour la phase d'écoulement laminaire qui correspond aux altitudes supérieures à 47 Km.

Au cours d'une rentrée atmosphérique, une navette passe donc d'un écoulement figé à haute altitude à un écoulement à l'équilibre à basse altitude [10]. Entre ces deux régimes extrêmes, l'écoulement est en déséquilibre chimique et met en jeu de nombreux temps caractéristiques dépendant de l'altitude et des réactions (section 7.2.1). Enfin, la taille de l'appareil intervient aussi dans le rapport du temps de convection sur le temps de production chimique. Lorsque la taille augmente, le temps de convection s'accroît et si les autres grandeurs restent constantes, ce rapport augmente. L'écoulement tend donc vers l'équilibre au bout de l'appareil.

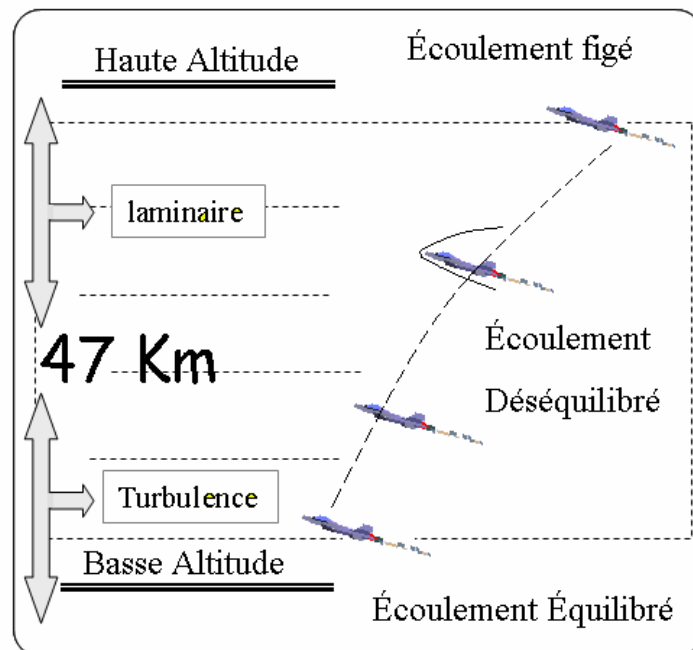


Figure 17. 2 : Evolution de l'écoulement en fonction de l'altitude

Nous avons étudié avec ce concept (corps axisymétrique équivalent) deux points particuliers de la trajectoire de rentrée du deuxième vol STS (Space Transporter

System). Ces points sont caractérisés par l'altitude h de la trajectoire et par un temps t (l'origine des temps correspond au point de vol de la trajectoire à une altitude d'environ 120 km équivalent au début du régime continu). Le premier point étudié correspond à une altitude 75Km et un temps de 460 s où l'on s'attend à une très forte influence du déséquilibre chimique et le second est en fin de rentrée à une altitude de 48 km et un temps de 1215 s et où l'influence du déséquilibre chimique devrait être faible. En effet, comme nous l'avons déjà mentionné lors de l'étude des temps caractéristiques, en fin de rentrée atmosphérique l'écoulement se rapproche de l'équilibre chimique.

Les conditions à l'infini amont et les caractéristiques géométriques de l'hyperboloïde équivalent sont données dans les tableaux 17.1 et 17.2, où θ est le demi angle au sommet des asymptotes et R_n le rayon du nez, les autres conditions de calcul seront précisées par la suite.

Pour ces deux cas, nous présentons en premier lieu une analyse de l'écoulement ainsi qu'une comparaison avec des résultats de couche limite au deuxième ordre [111] et [112]. Et en deuxième lieu, Nous envisageons une étude paramétrique des différents modèles choisis ; dans ce contexte l'influence du choix de l'équation d'état, du modèle chimique et de la modélisation des termes de transport sera étudiée.

Les grandeurs à la paroi sont définies par les relations (16.1), à savoir :

$$C_p = \frac{P - P_\infty}{0.5\rho_\infty u_\infty^2}, \quad C_f = \frac{\tau_p}{0.5\rho_\infty u_\infty^2}, \quad St = \frac{\phi_p}{\rho_\infty u_\infty C_{p_\infty} [T_\infty - T_p]} \quad (17.1)$$

Tableau 17. 1: Conditions à l'infini amont pour l'hyperboloïde Début de la rentrée atmosphérique Cas 1

Paramètres de calcul		
$t = 460$ s	$H = 74.98$ km	$U_\infty = 7200$ m/s
$\rho_\infty = 3.815 \cdot 10^{-5}$ kgm ⁻³	$T_\infty = 198$ °K	$M_\infty = 25.5$
$Re = 2.7 \cdot 10^4$	$H_\infty = 2.61 \cdot 10^7$ J/ kg	$Kn = 0.0014$
$T_p = 1050$ °K	$\theta = 40.75^\circ$	$R_n = 1.276$ m

Tableau 17. 2: Conditions à l'infini amont pour l'hyperboloïde Fin de la rentrée atmosphérique, Cas 2

Paramètres de calcul		
$t = 1215$ s	$H = 47.67$ km	$U_\infty = 2960$ m/s
$\rho_\infty = 1.344 \cdot 10^{-3}$ kgm ⁻³	$T_\infty = 260$ °K	$M_\infty = 9.15$
$Re = 2.55 \cdot 10^5$	$H_\infty = 4.64 \cdot 10^6$ J/ kg	$Kn = 5.4 \cdot 10^{-5}$
$T_p = 800$ °K	$\theta = 35.50^\circ$	$R_n = 1.056$ m

les maillages sont construits de manière analytique (voir figure 17.3, où l'on a représenté uniquement un point sur quatre) : ils sont formés d'un réseau d'hyperboles de même foyer que l'hyperbole représentant le corps et d'un réseau d'ellipses orthogonales. Dans la direction ξ , les points sont resserrés près du point de stagnation selon une progression géométrique, de même dans la direction orthogonale η très près de la paroi. Un maillage fin a été utilisé pour les comparaisons avec la couche limite et un deuxième maillage plus grossier a été préféré pour l'étude paramétrique. où on a déjà

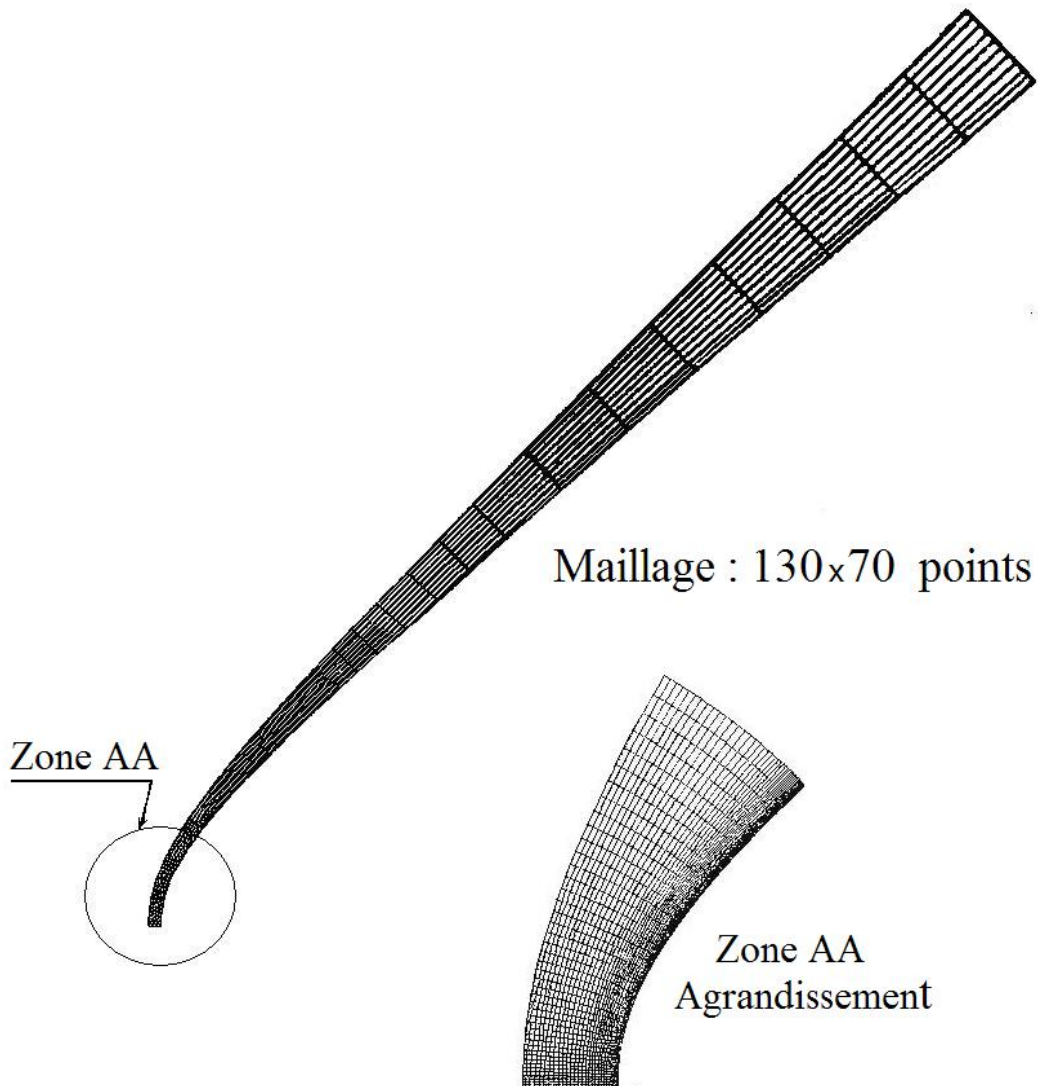


Figure 17. 3 : Profil du Maillage à 130 x 70 points

défini et pour rappel $\Delta\eta_1$ comme étant la hauteur de la première maille par rapport à la paroi, $\Delta\eta_{max}$ la hauteur maximale d'une maille sur la ligne de symétrie du nez, $\Delta\xi_1$ distance de la première maille à la ligne de symétrie du nez et $r = \Delta\eta_1 / \Delta x_1$: l'allongement de la première maille. Pour l'écoulement à $M_\infty = 9.15$, un seul maillage a été utilisé. Le maillage utilisé pour le code Numérique élaboré dans le cadre des comparaisons avec les résultats de couche limite comporte 100 points dans la direction orthogonale dont plus de 40 dans la couche limite.

Les principales caractéristiques des maillages précités sont données dans le tableau 17.3.

Tableau 17. 3 : Caractéristiques des maillages utilisées

Nbre de Mach	Maillage	N_ξ	N_η	$\Delta\eta_1$ (m)	$\Delta\eta_{max}$ (m)	$\Delta\eta_1 / \Delta l_{max}$	$\Delta\xi_1$ (m)	r
9.15	grossier	130	70	$4.4 \cdot 10^{-5}$	$4.4 \cdot 10^{-5}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$
25.5	grossier	130	70	$2.4 \cdot 10^{-5}$	$2.4 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$
	Fin	155	100	$1.42 \cdot 10^{-5}$	$2.16 \cdot 10^{-3}$	$6.5 \cdot 10^{-3}$	$8.4 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$

17.1. Résultats en rapport avec le nombre de Mach

Les modélisations choisies pour les deux cas de calcul sont les mêmes et sont indiquées dans le tableau 17.4 :

Tableau 17. 4 : Modélisation choisie

Paramètres de calcul	
$Le = 1.2$	λ : Wilke, Eucken
Modèle Thermodynamique = polynômes	ω_I : Park
μ : Wilke, Blottner	Paroi catalytique ou non

Les résultats du code élaboré au cours de cette étude ont été comparés avec ceux obtenu par le code de M. Sawley et S. Wüthich [111] et [159] développé à EPF de Lausanne (Suisse) ; lequel a été couplé au deuxième ordre à un solveur Euler (prenant en compte les effets de déplacement par l'intermédiaire d'une vitesse de transpiration à la paroi) pour les écoulement en déséquilibre chimique, développé par J. Vos et M. Bergman [146]. Nous donnons ici les caractéristiques essentielles de ces codes

Le code Euler utilise à la base un schéma centré avec une viscosité artificielle. L'intégration explicite en temps suit un schéma Runge - Kutta à quatre pas. L'onde de choc externe est ajustée tandis que les éventuels ondes de choc internes sont capturés. Le programme de couche limite, quant à lui, utilise un schéma aux différences finies, totalement implicite. Le couplage entre les deux programmes a lieu de la façon suivante :

- un premier calcul Euler fournit les pressions à la paroi, ainsi que les fractions massiques et la pression au point d'arrêt comme entrée du calcul de couche limite.
- le calcul de couche limite au premier ordre qui suit donne les vitesses de transpiration de la paroi (prenant compte les effets de déplacement)
- un calcul Euler est ensuite effectué en prenant en compte les vitesses de transpiration
- enfin, un calcul de couche limite, retenant les termes de deuxième ordre dans le développement des équations en fonction de $Re^{-1/2}$, ferme la procédure. Ce calcul nécessite la donnée des pressions, température, vitesse tangentielle et fraction massique à la frontière entre la couche limite et la région non visqueuse. Cette frontière est déterminée par la distance à la paroi δ_u , à laquelle la vitesse tangentielle donnée par le code de couche limite au premier ordre vaut 99% de sa valeur limite. Les valeurs à la frontière sont alors obtenues par interpolation des résultats de calcul Euler précédent, à cette distance δ_u

Comme nous l'avons indiqué précédemment, le maillage utilisé comporte 100 points dans la direction η dont plus de 40 dans la couche limite. D'autre part, sachant que dans ces cas l'onde de choc est vraiment très proche de la paroi, la lecture des lignes iso est très difficile. Par conséquent, nous ne présentons donc que les profils à travers la couche de choc.

- Cas $M_\infty = 25.5$

Pour une paroi non catalytique, les figures 17.4 et 17.5 donnent les comparaisons entre les méthodes N.S et Euler – Couche Limite des profils de pression et de température, suivant la normale à la paroi en différentes abscisses le long de l'hyperboloïde. On note sur les profils de pression que celle-ci est quasiment constante sur une normale à la paroi. La température maximale atteint 14 000 °K juste derrière l'onde de choc, sur l'axe de symétrie. Un fort gradient, induit par les phénomènes de dissociation, réduit la température jusqu'à environ 7200 °K à la frontière de la couche limite. L'accord entre les résultats sur les profils de température est excellent, les courbes se superposant aussi bien près de la paroi qu'au delà.

Les profils de fractions massiques pour une paroi non catalytique sont donnés sur les figures 17.6 à 17.9. Là encore l'accord est très bon, la différence maximale entre les deux résultats est de 5% sur les fractions massiques d'azote atomique. On remarque que la dissociation totale de l'oxygène est immédiate tandis qu'environ 60 % de l'azote est dissocié à la paroi. Le monoxyde d'azote est formé juste derrière l'onde de choc puis est rapidement détruit.

Pour une paroi totalement catalytique, les profils de température, pression et fractions massiques à $x = 2$ m sont donnés sur la figure 17.10. L'accord entre les résultats reste le même.

- Cas $M_\infty = 9.15$

Ce cas est caractérisé d'une part par un déséquilibre chimique moins important (la dissociation moléculaire est assez faible) et d'autre part, par une couche limite moins épaisse (le facteur $M_\infty \cdot Re^{-1/2}$ est moindre). Nous limitons la comparaison entre les deux codes aux grandeurs à la paroi.

La figure 17.11 donne le profil de température le long de l'axe. On remarque que la courbe est quasiment constante dans la couche de choc, jusqu'à la frontière de la couche limite ; on ne décèle plus le fort gradient de température caractéristique de la dissociation moléculaire. La valeur maximale a été estimée à un ordre de 3800 °K. Les profils de fractions massiques sont tracés sur la figure 17.12 où l'on peut vérifier que les phénomènes de dissociation sont effectivement faibles.

- Catalycité

Enfin, le nombre de Stanton à la paroi est donné pour les deux nombres de mach étudiés sur la figure 17.13. Les résultats issus des calculs et du code Euler – couche limite coïncident. Les données provenant de mesure de vol ont été aussi portées sur la courbe. Ces valeurs ne sont qu'à titre indicatif, le pouvoir catalytique réel de la paroi n'étant pas connu exactement.

Pour le cas $M_\infty = 25.5$, On peut noter l'influence de la catalycité. En effet, comme nous l'avons déjà mentionné, une paroi catalytique active les réactions chimiques : le mélange a donc tendance à retourner vers l'équilibre. Vu les températures de la paroi (de l'ordre de 1000°K) les atomes sont recombinaés et le monoxyde d'azote (NO) disparaît. Ces processus sont exothermiques, le flux de chaleur augmente. En revanche pour une paroi non catalytique, le mélange peut rester partiellement dissocié. On retrouve tout à fait ce comportement sur les figures 17.6 à 17.9 et 17.10 donnant les profils des concentrations. On remarque aussi un pic de monoxyde d'azote près de la paroi totalement catalytique, inexistant pour une paroi non catalytique. En effet, dans une plage de température autour de 3000 à 4000°K, le monoxyde d'azote est stable et la recombinaison des atomes en monoxyde d'azote est possible. Ensuite la paroi étant froide, le monoxyde d'azote disparaît.

Les flux de chaleur au point d'arrêt varient dans un rapport de 2.5 environ selon que la paroi est totalement catalytique ou non catalytique. Enfin, au fur et à mesure que l'on avance le long de la paroi, l'influence de la catalycité s'amenuise. En effet, l'écoulement est de plus en plus relaxé et tend vers l'équilibre. La catalycité joue ainsi un rôle d'activation des réactions chimiques moins important.

Par contre, dans le cas où $M_\infty = 9.15$, les conditions amont entraînent un écoulement plus proche de l'équilibre, l'influence de la catalycité de la paroi est très faible. Ces courbes montrent de plus que pour les deux types de paroi considérés (catalytique et non catalytique) l'accord entre les deux méthodes est excellent.

Conclusion

Cette comparaison des résultats nous a permis tout d'abord une validation des deux méthodes calcul. Elle montre que l'approche Euler – couche limite au deuxième ordre permet de prédire avec la même précision que celle donnée par notre code alors que les méthodes de couplage au premier ordre donnent des résultats sensiblement différents [116].

En ce qui concerne la comparaison entre les méthodes de couplage au premier et au deuxième ordre, nous avons conclu que l'approche couplée est particulièrement adaptée sur ce type de géométrie et permet de diminuer les temps de calcul. Par contre, pour des géométries telles que la double ellipse par exemple et que nous avons présentée dans le chapitre 16 l'approche couplée ne permet pas de calculer entièrement l'extrados vu que ce dernier est équipé d'une verrière.

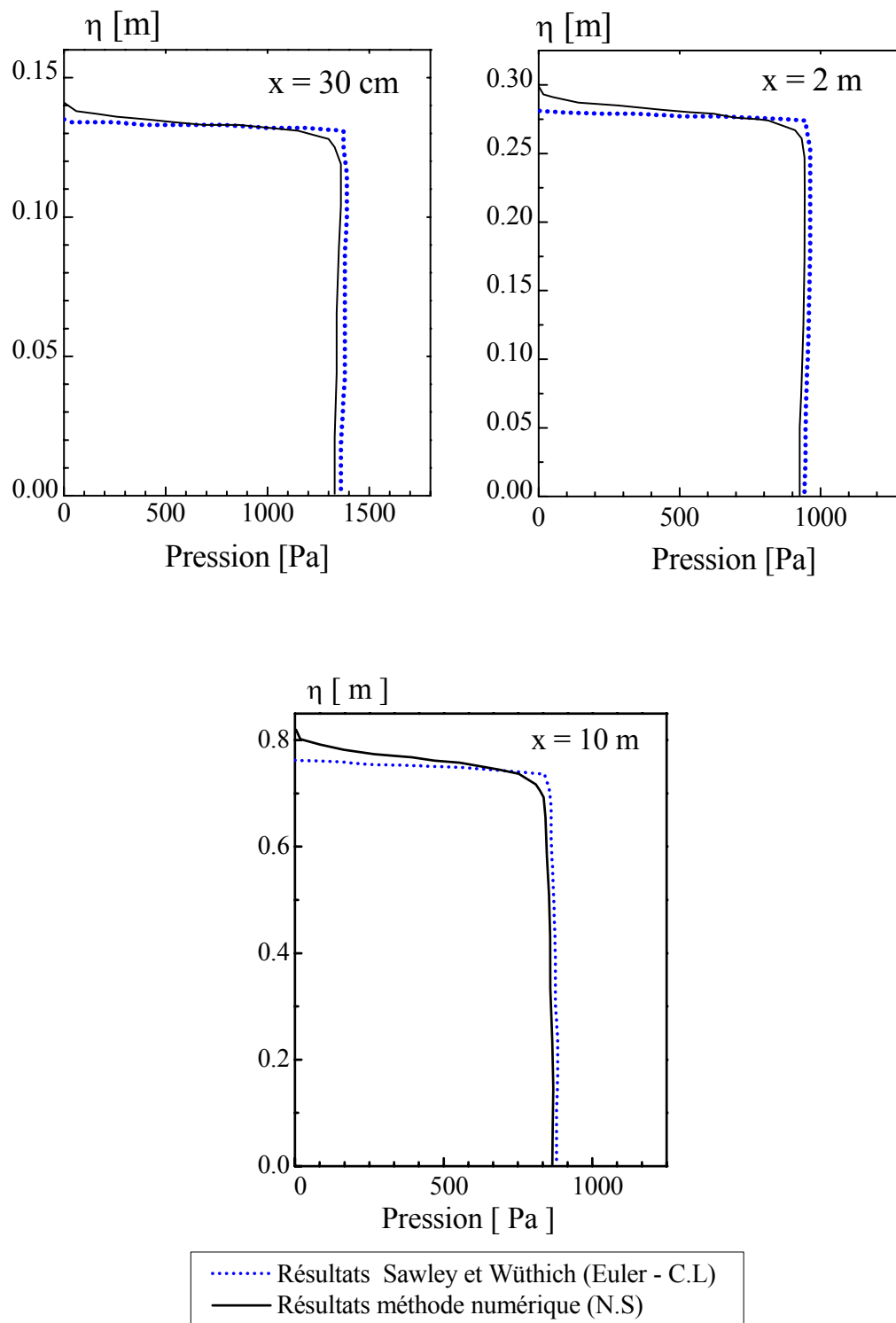


Figure 17. 4 : Hyperboloïde ; profils de pression en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

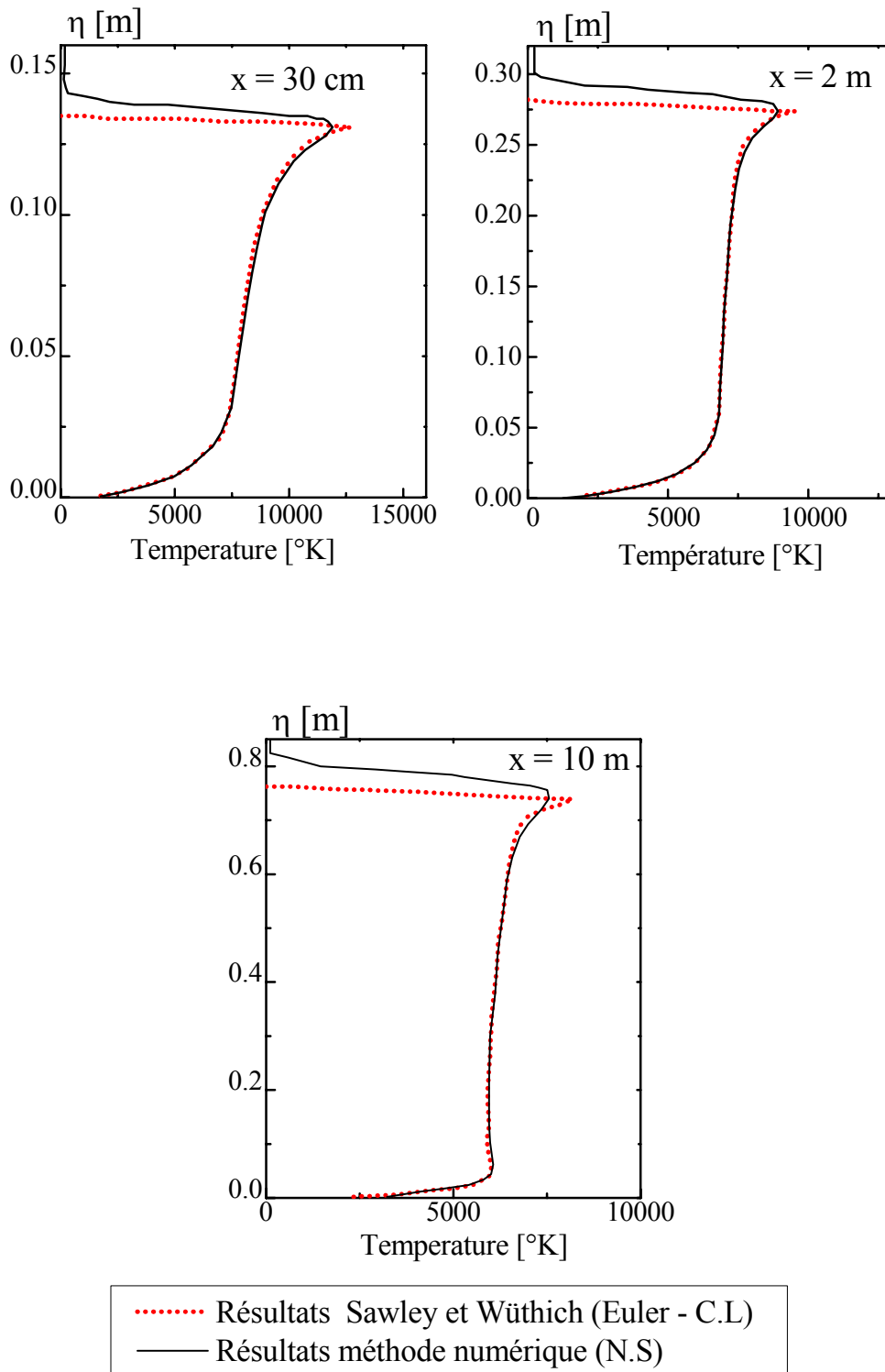


Figure 17. 5 : Hyperboloïde ; profils de température en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

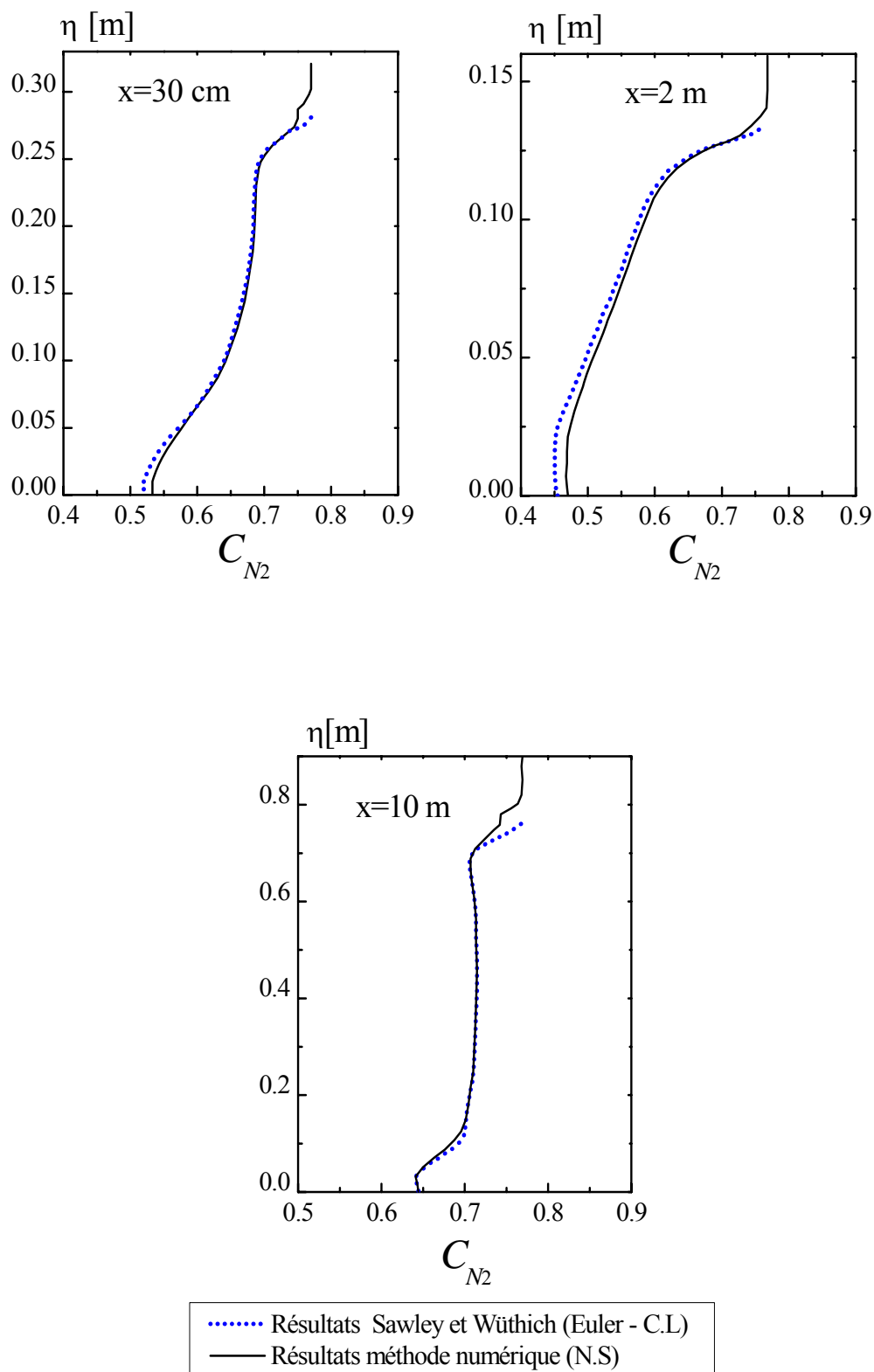


Figure 17. 6: Hyperboloïde ; profils de la concentration (fraction massique) de l'Azote moléculaire en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

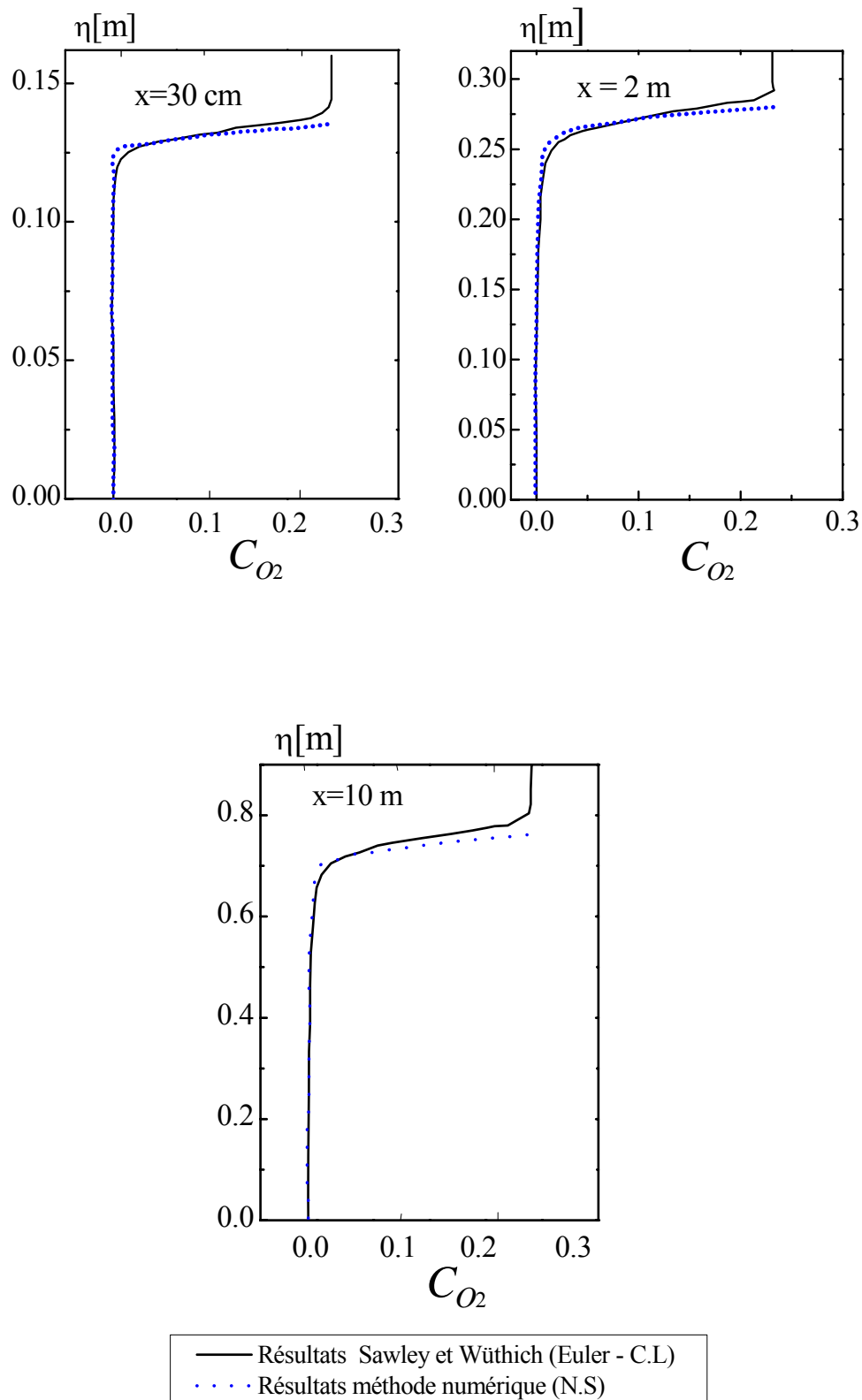


Figure 17. 7 : Hyperboloïde ; profils de la concentration (fraction massique) de l'oxygène moléculaire en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

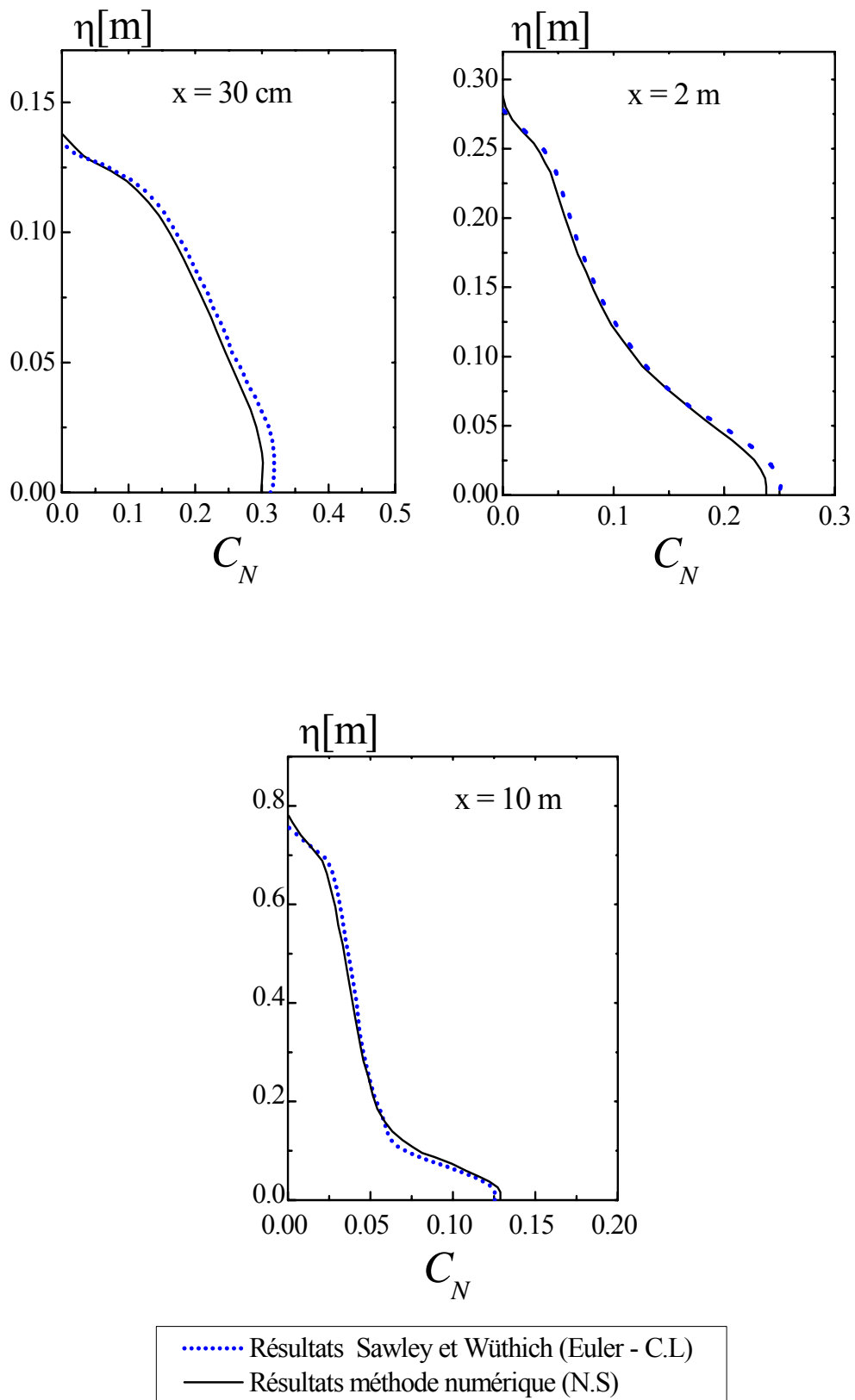


Figure 17. 8 : Hyperboloïde ; profils de la concentration (fraction massique) de l'Azote atomique en $x = 0.3 \text{ m}$, 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

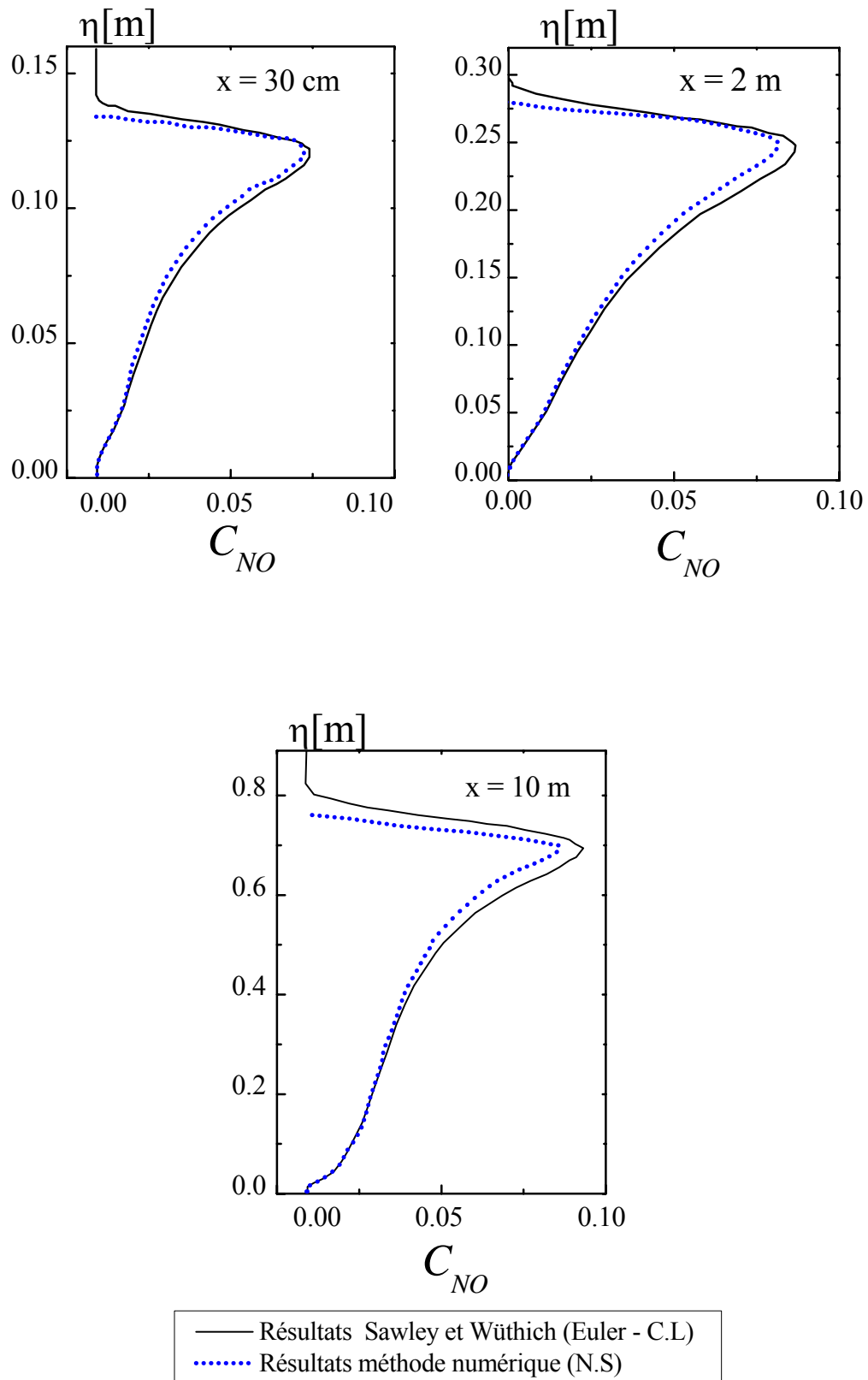


Figure 17. 9: Hyperboloïde ; profils de la concentration (fraction massique) du monoxyde d'azote en $x = 0.3$ m , 2 m et 10 m , paroi non catalytique , $M_\infty = 25.5$

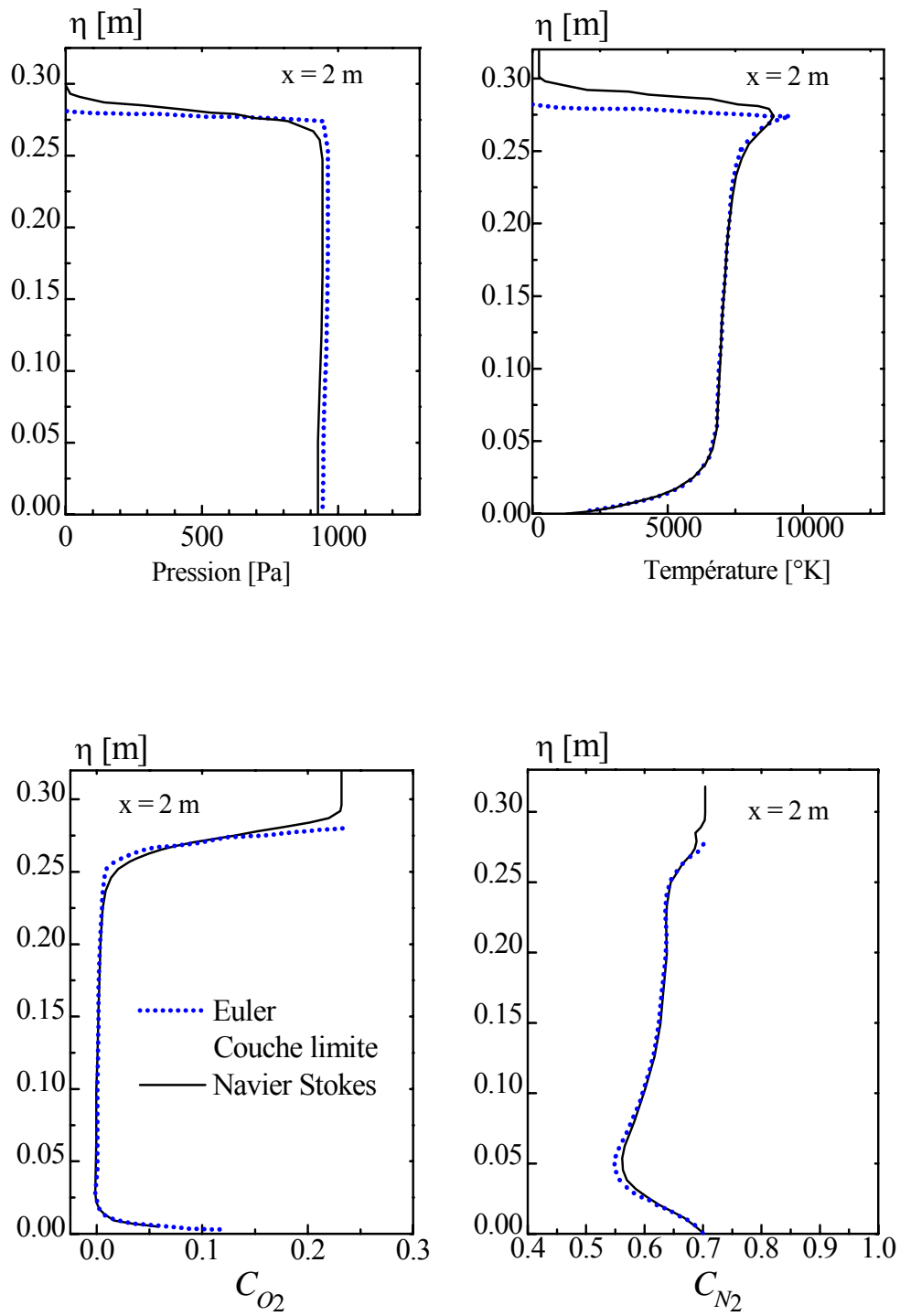


Figure 17. 10 : Hyperboloïde ; profils en $x = 2$ m , paroi catalytique , $M_\infty = 25.5$

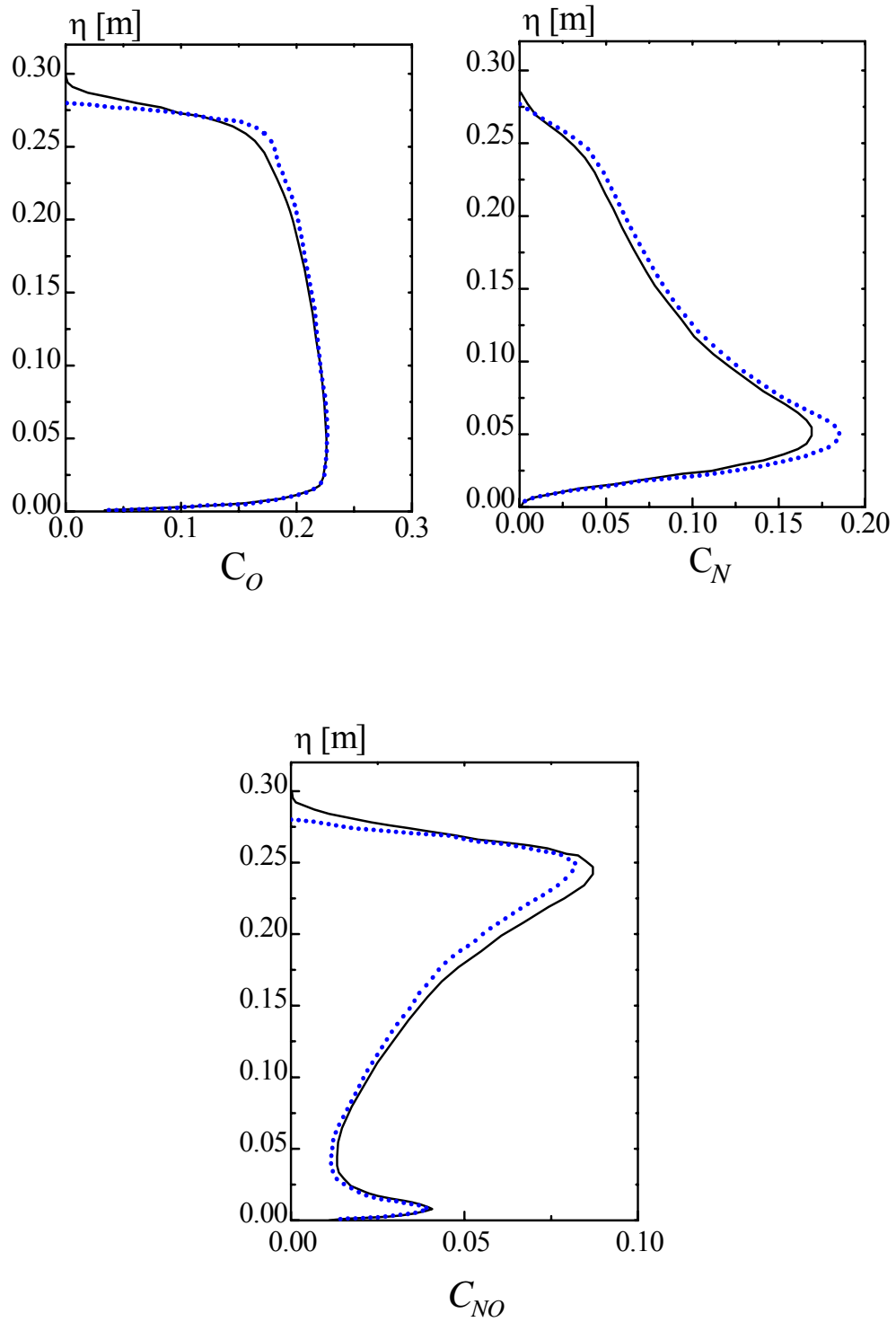


Figure 17.10 : Hyperboloïde ; profils en $x = 2$ m , paroi catalytique , $M_\infty = 25.5$ (suite)

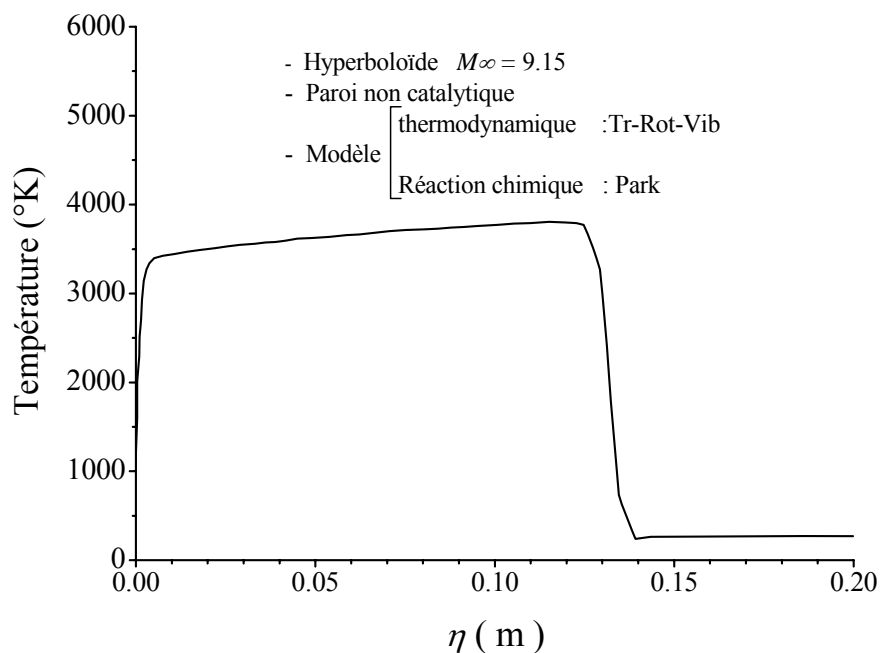


Figure 17. 11 : profil de température sur l'axe, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$

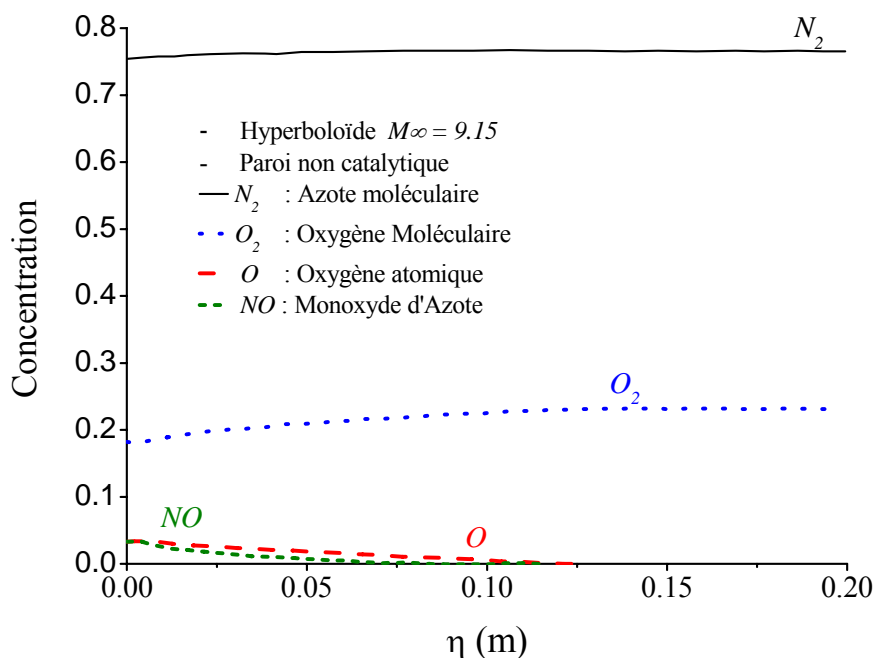


Figure 17. 12 : profil de fractions massiques sur l'axe, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$

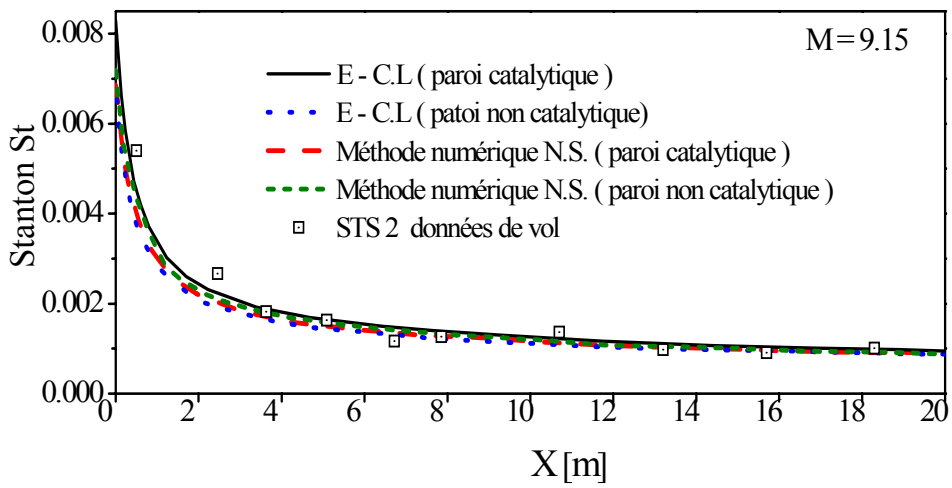
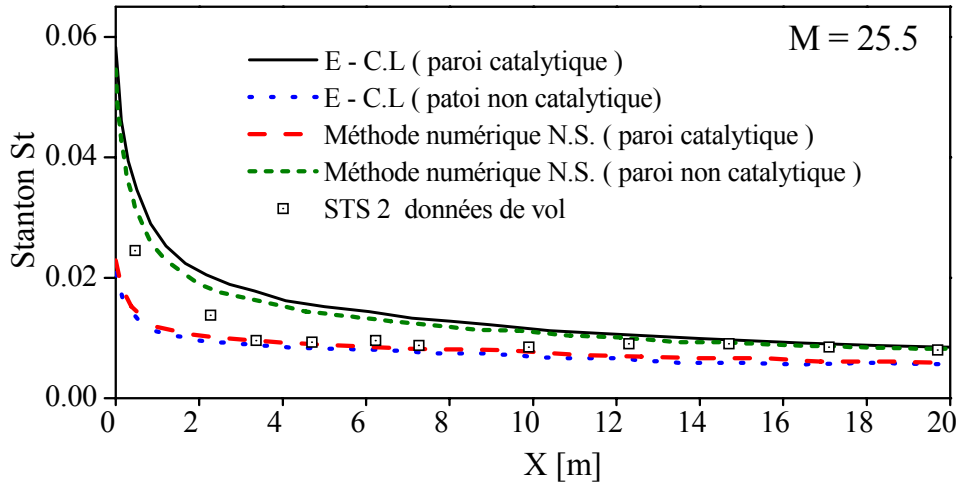


Figure 17. 13 : Coefficient de Stanton à la paroi, Hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$ et 25.5

17.2. Influence du modèle thermodynamique

Nous nous intéressons dans cette section à l'influence de la représentation thermodynamique choisie sur les paramètres caractéristiques de l'écoulement. Nous avons considéré comme il a déjà été mentionné dans le chapitre 3 trois cas différents :

- Cas 1 : Représentation polynomiale prenant en considération la totalité du processus
- Cas 2 : Représentation tenant compte de la translation pour les espèces atomiques et la combinaison de la translation, la rotation et la vibration pour les espèces moléculaires
- Cas 3 : Représentation simplifiée qui ne tient compte que de la translation pour les espèces atomiques et uniquement la translation et la rotation pour les espèces moléculaires avec comme valeur constante la chaleur spécifique à pression constante C_p .

Le reste des conditions de calcul est détaillé dans le tableau 17.5 ci-dessous :

Tableau 17. 5: Modélisation choisie pour l'étude de l'influence du modèle thermodynamique de l'équation d'état

Paramètres de calcul	
$Le = 1.2$	λ : Wilke, Eucken
Modèle Thermodynamique = 3 cas	ω_I : Park
μ : Wilke, Blottner	Paroi catalytique ou non

Dans le cas d'une représentation thermodynamique simplifiée , la température derrière l'onde de choc est nettement supérieure vu que pour un même niveau d'énergie, la chaleur spécifique à volume constant est moindre , ce qui entraîne une température supérieure (voir figure 17.14) . La masse volumique est alors plus faible et l'onde de choc a tendance à s'éloigner de la paroi. Cependant en remarque que le fort niveau de température derrière l'onde de choc implique une dissociation moléculaire plus accentuée ce qui a pour conséquence une baisse rapide de la température et une réduction de la différence qui existe entre les modélisations , et cela en remplaçant les molécules par des atomes . A mach 25.5, les niveaux de température donnée par les trois modèles se rejoignent rapidement. A mach 9.15 les molécules sont moins dissociées et la surestimation de température derrière l'onde de choc n'est plus compensée. L'éloignement de l'onde de choc de la paroi est ainsi plus notable. Les différences entre le cas 1 (modèle polynomial) et le cas 2 (modèle prenant en compte la translation, la rotation et la vibration) sont plus faibles, malgré que le cas 1 conduit à des températures plus élevées au dessous d'environ 8000°K.

On vérifie ce comportement sur les profils de fractions massiques sur l'axe (figure 17.15 et 17.16), la dissociation de l'Azote est plus importante dans le cas d'une équation d'état simplifiée. Cet effet collabore moins pour l'oxygène dont la dissociation est totale. Comme on peut dire que le niveau de dissociation complète est atteint plus rapidement dans la couche de choc lorsque l'équation d'état est simplifiée (cas 3)

En conclusion nous pouvons dire que les trois différentes représentations donnent des profils semblables dans la couche de choc. L'influence de l'équation d'état sur le coefficient pariétal de Stanton est minime (voir figure 17.17et 17.18)

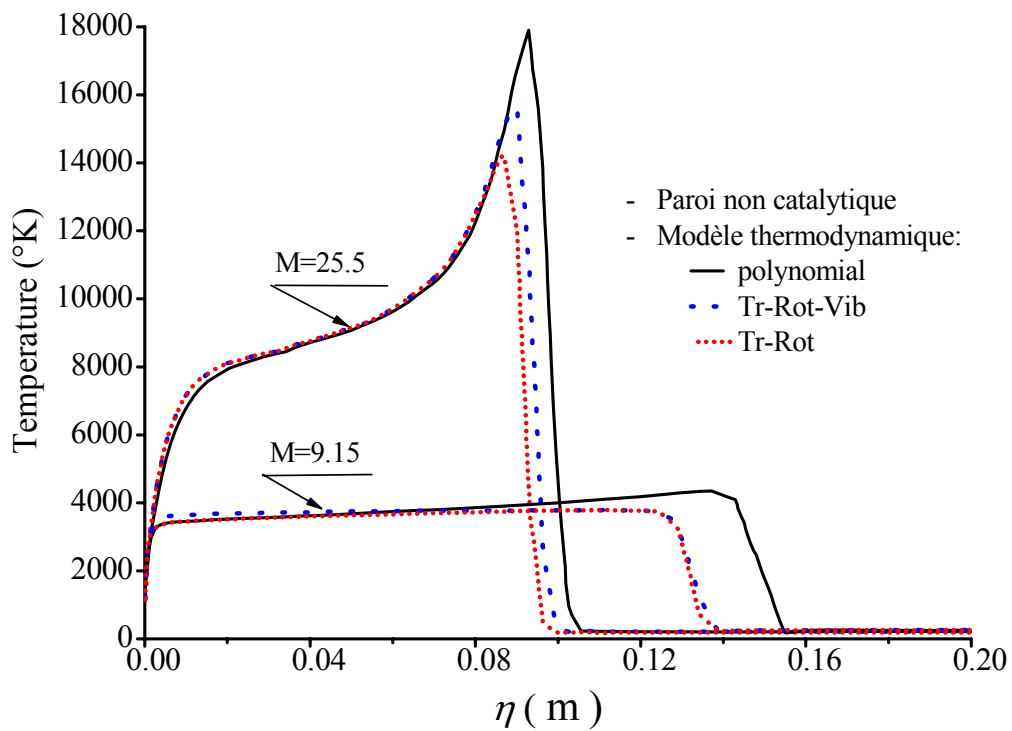


Figure 17. 14 : Profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_{\infty} = 9.15$ et 25.5

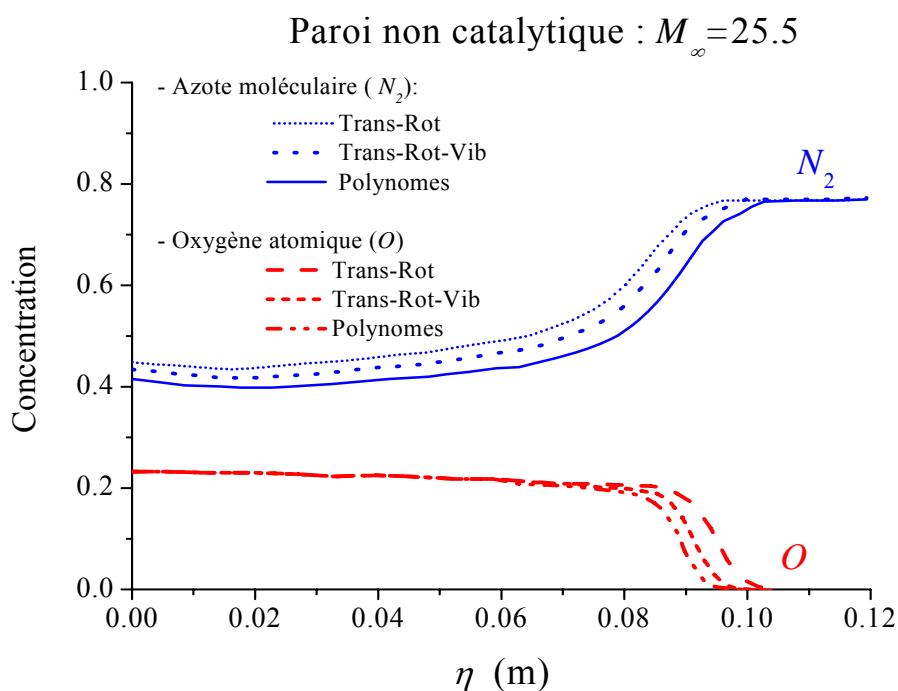


Figure 17. 15 : Profils de fractions massiques la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$

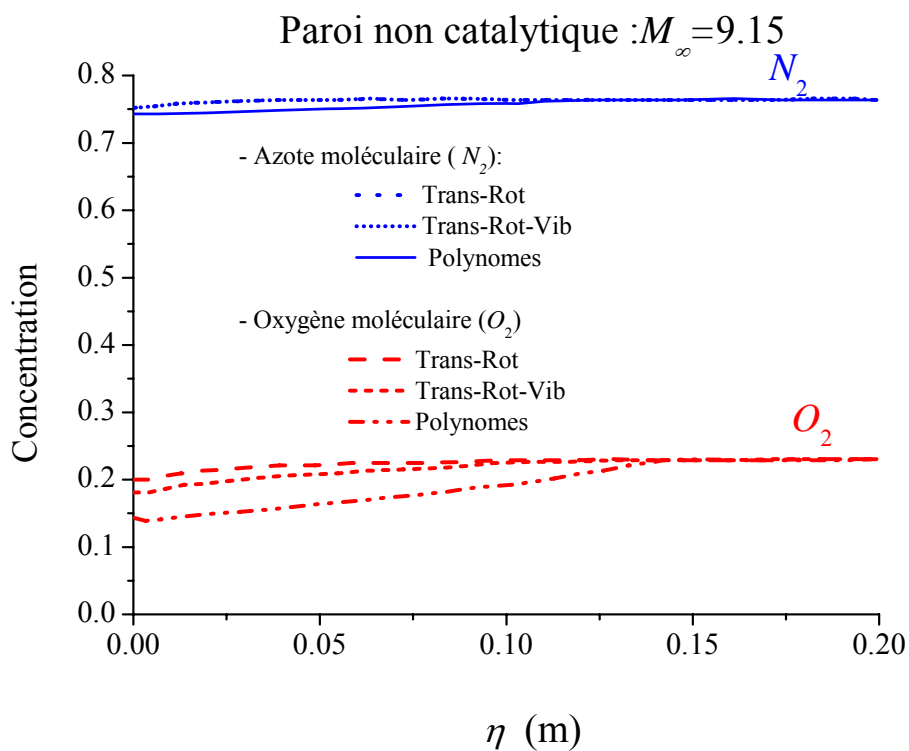


Figure 17. 16 : Profils de fractions massiques la ligne de symétrie : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$

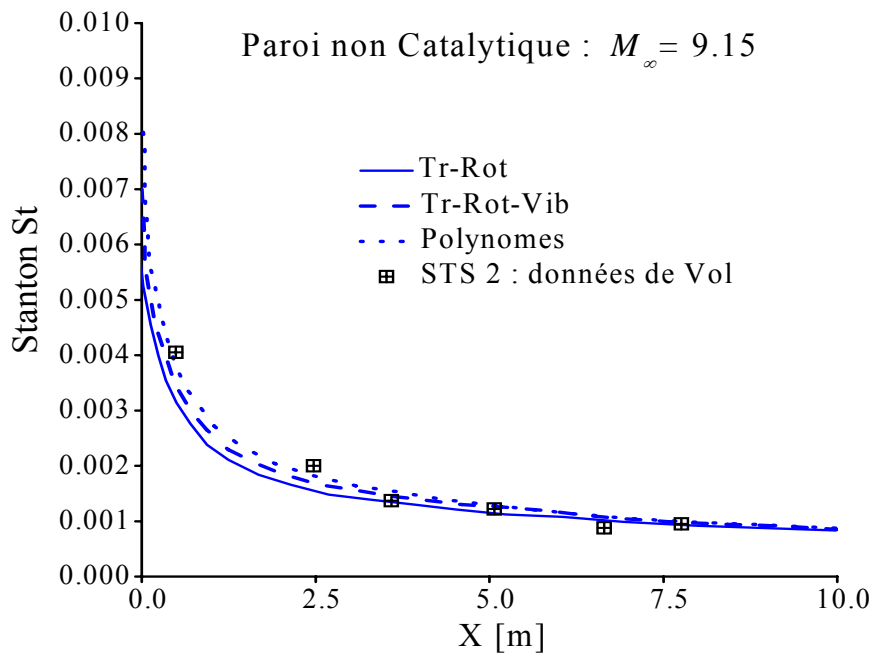


Figure 17. 17 : Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_{\infty} = 9.15$

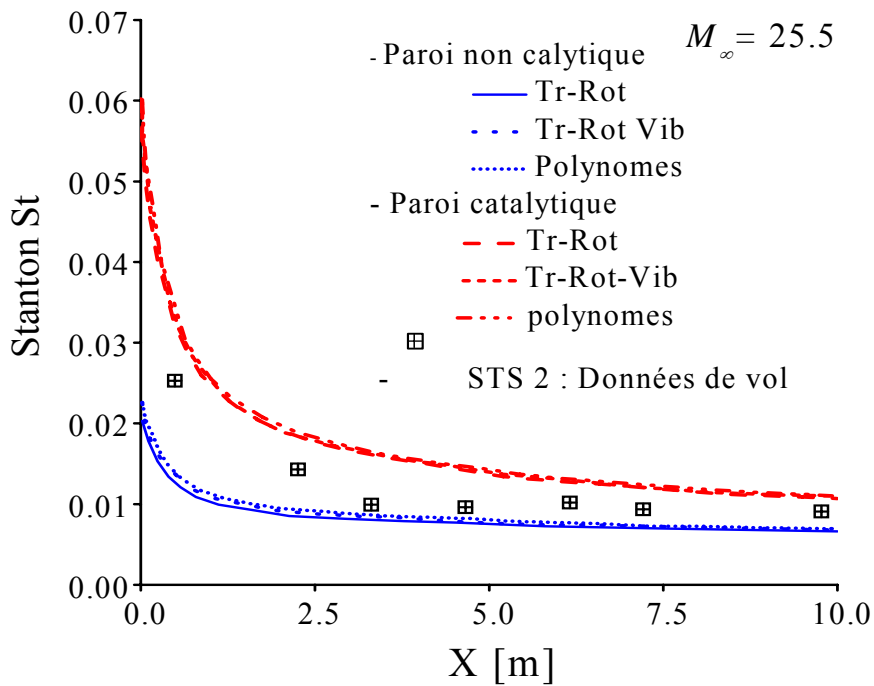


Figure 17. 18: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle thermodynamique, hyperboloïde, $M_{\infty} = 25.5$

17.3. Influence des représentations chimiques

Nous allons nous intéresser dans cette section à l'influence du choix du modèle chimique sur la détermination de la couche de choc. Nous savons que la détermination de la vitesse de réaction est très délicate et il existe de grandes différences entre les modèles existants dans la littérature. Dans notre étude nous avons considéré les deux modèles les plus largement utilisés, à savoir les modèles de Park [97] et de Gardiner [46]. Les valeurs numériques des constantes intervenant dans le calcul des vitesses directes de réactions sont présentées en annexe A. dans les deux cas, la vitesse inverse est déterminée au moyen de la constante d'équilibre donnée par le modèle de Park. Les autres conditions de calcul sont résumées dans le tableau 17.6 ci-dessous :

Tableau 17. 6 : Modélisation choisie pour l'étude de l'influence du modèle chimique

Paramètres de calcul	
$Le = 1.2$	λ : Wilke, Eucken
Modèle thermodynamique Trans – Rot - Vib	ω_I : Park ou Gardiner
μ : Wilke, Blottner	Paroi catalytique ou non

Les vitesses de réactions données par le modèle de Park sont en général plus rapides que celles données par le modèle de Gardiner [42]. Les phénomènes de dissociation sont donc plus importants dans le cas du modèle de Park, ce qui entraîne des niveaux de température moindres. Par conséquent, avec cette modélisation, l'onde de choc se rapproche de la paroi. Ce phénomène est largement vérifié sur les figures 17.19, 17.20 et des fraction massique de la figure 17.21 et 17.22.

Les vitesses de réaction concernant la dissociation du monoxyde d'azote diffèrent fortement, le modèle de Park pouvant prédire des vitesses de réactions trois fois supérieures à celles données par le modèle de Gardiner. Le monoxyde d'azote est donc nettement plus instable avec le modèle de Park, ce qu'on peut vérifier sur les figures 17.23 et 17.24: les données de Gardiner conduisent à une concentration maximale d'environ 15 % de monoxyde d'azote tandis que celle de Park ne dépasse pas les 4 % pour un écoulement à $M_\infty = 25.5$

Les figures 17.25 et 17.26 donnent les nombres de Stanton à la paroi pour les deux cas de calcul. Les flux de chaleur sont les mêmes en paroi totalement catalytique car, la paroi étant froide, la catalycité impose une recombinaison complète des atomes à la paroi. En paroi non catalytique, le flux de chaleur prédit par le modèle de Park est environ 6% inférieur à celui donné par le modèle de Gardiner. En effet, à $M_\infty = 25.5$ on voit par exemple que les réactions de recombinaison de l'azote, à travers des collisions avec des atomes ou de l'azote moléculaire lesquels représentent les seules espèces présentes près de la paroi, sont les seules réactions dont la vitesse préconisée par le modèle de Gardiner est supérieure ou égale à celle donnée par le modèle de Park. D'un autre côté, la recombinaison exothermique de l'azote est donc plus marquée avec le modèle de Gardiner, ce qui vraisemblablement augmente le flux de chaleur.

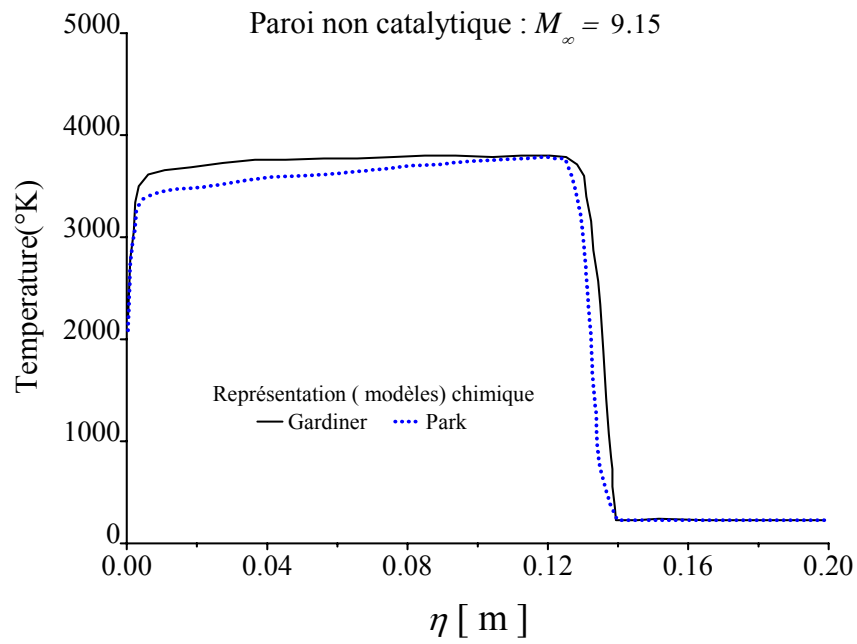


Figure 17. 19: profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_{\infty} = 9.15$

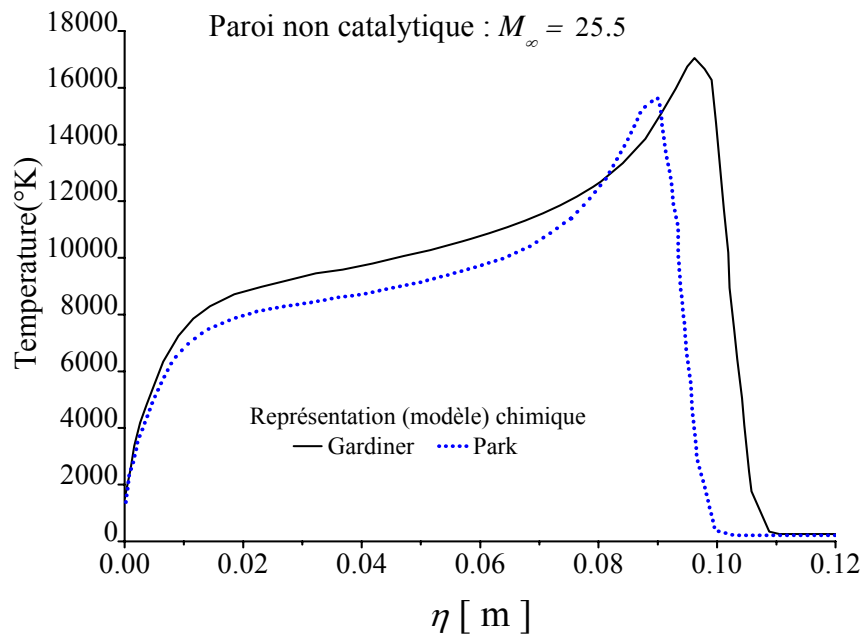


Figure 17. 20: profils de température sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_{\infty} = 25.5$

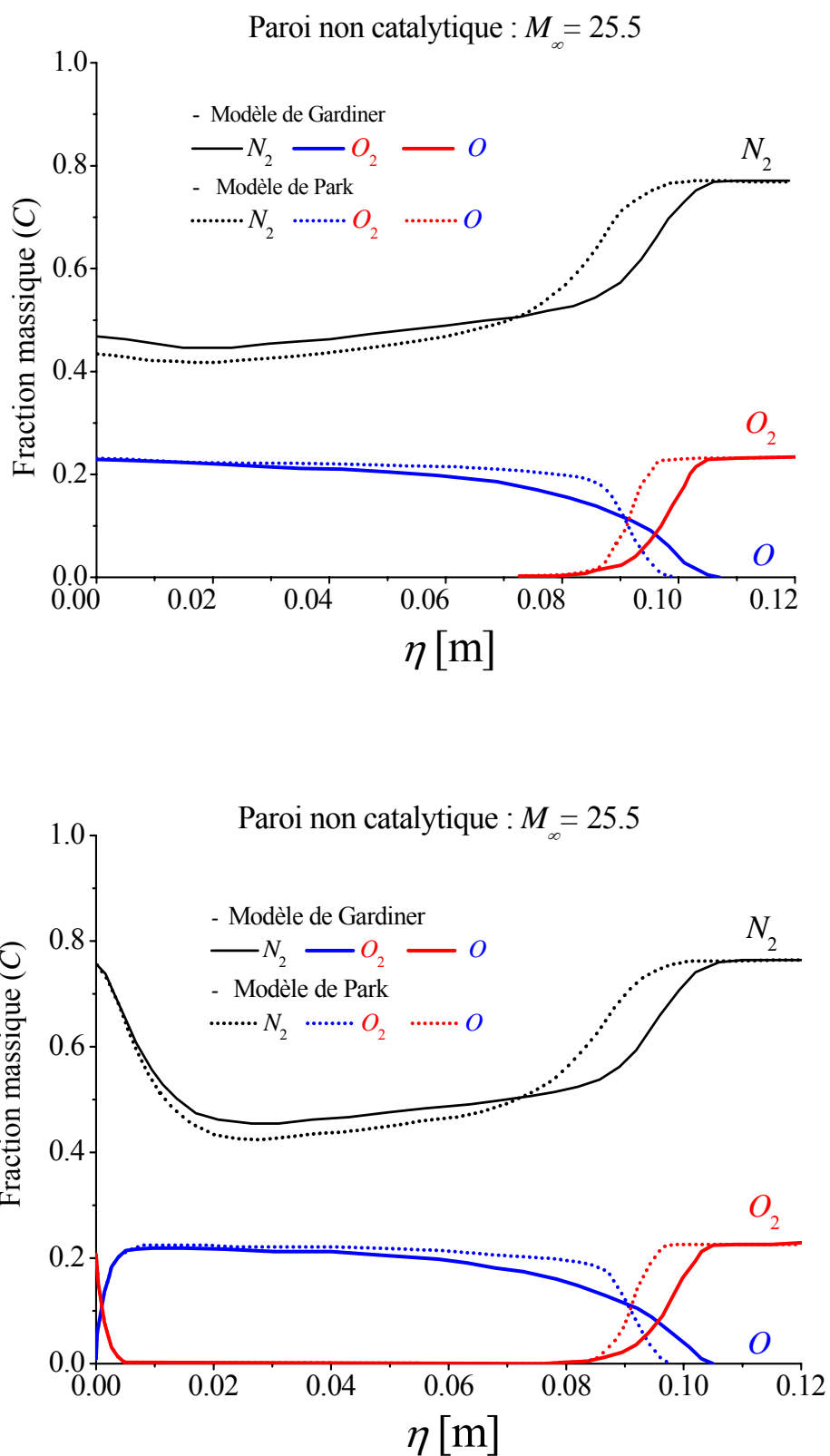


Figure 17. 21: profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$

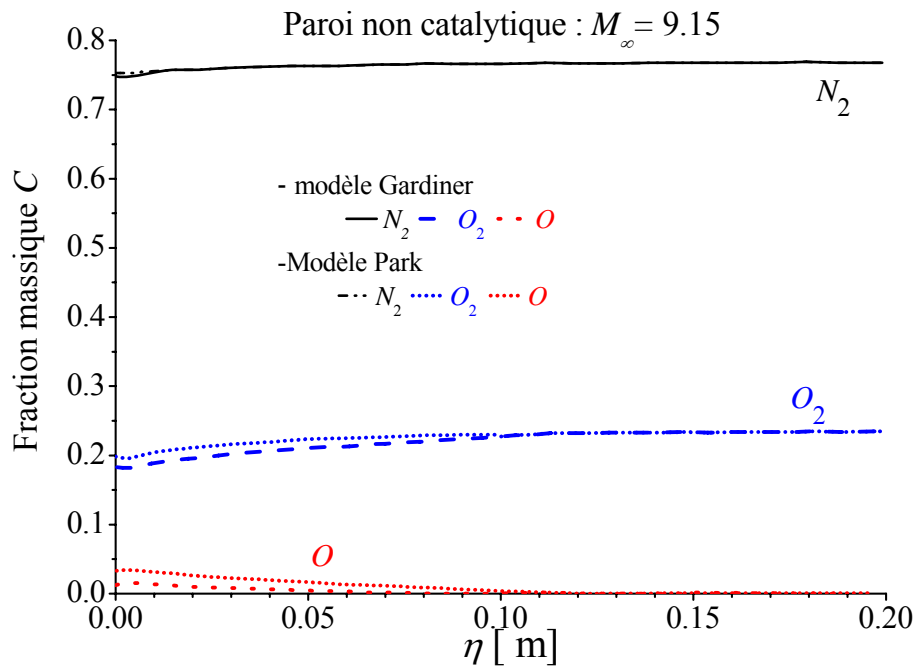


Figure 17. 22: profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$

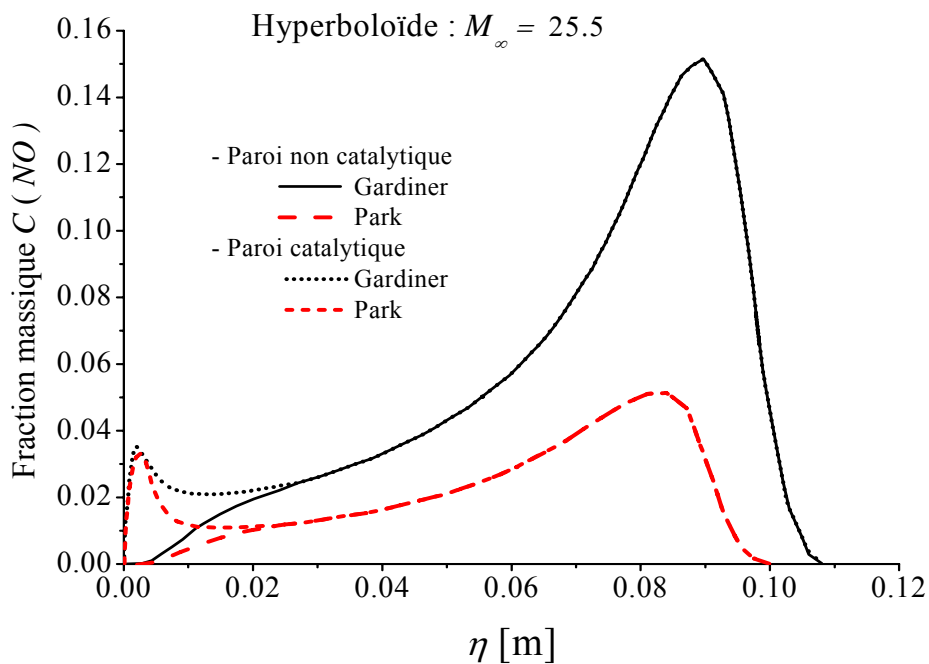


Figure 17. 23: profils de fraction massique de monoxyde d'azote sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$

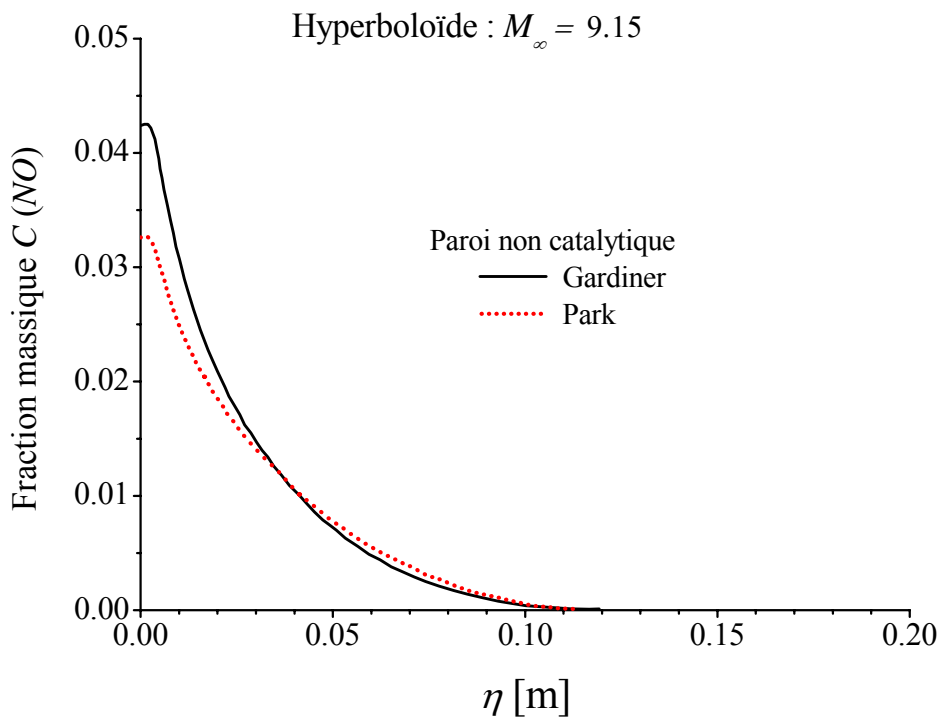


Figure 17. 24: profils de fraction massique de monoxyde d'azote sur la ligne de symétrie : influence du modèle chimique hyperboloïde, $M_\infty = 9.15$

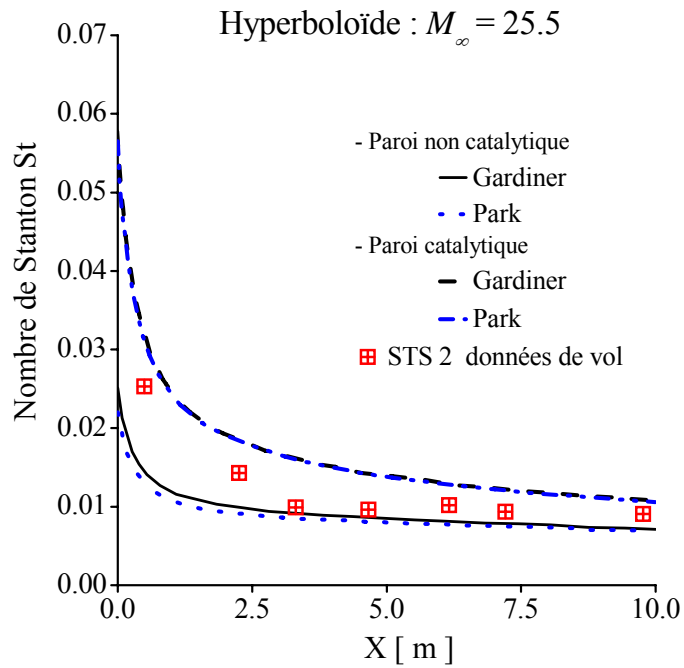


Figure 17. 25 : Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$

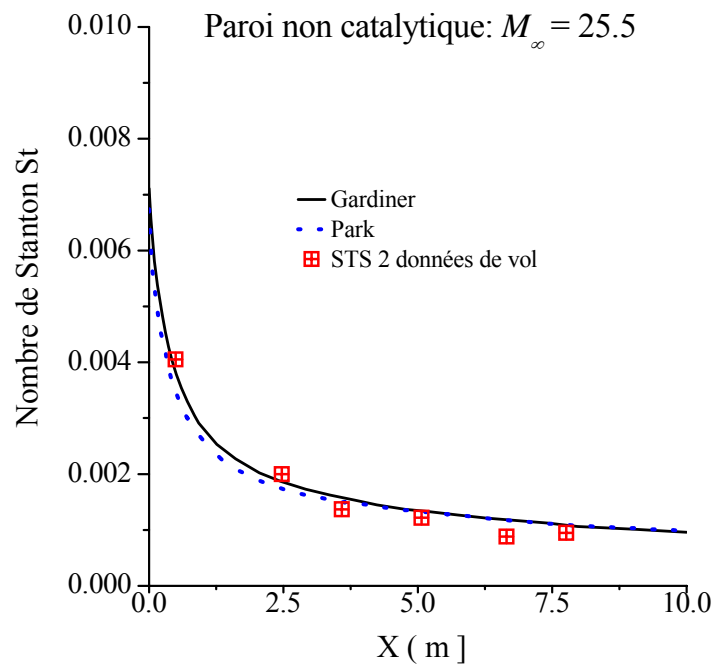


Figure 17. 26: Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 9.15$

17.4. Influence du modèle de diffusion

Le modèle de Wilke [148] pour le calcul de la viscosité du mélange est mis à défaut pour des températures supérieures à 7500 °K. A une atmosphère (1 atm) , pour de l'air éventuellement ionisé en équilibre chimique , la loi de Wilke donne un pic de viscosité à 7500 °K au lieu de 11000°K. Armaly [7]et Sutton [8] ont proposé une autre loi pour la détermination de la viscosité du mélange en retenant la simplicité de la formulation de Wike mais avec d'autres coefficients . Cette loi est en accord avec les résultats utilisant les intégrales de collisions [166] jusqu'à 20 000 °K ; et elle a toujours été recommandée pour les mélanges ionisés. Leur modélisation entraîne une augmentation moyenne de la viscosité de l'ordre de 6%.

Pour les cas étudiés dans cette thèse, la température à l'extérieur de la couche limite vaut environ 7400°K pour $M_\infty = 25.5$, ce qui est à la limite de la validité de la loi de Wilke. Par conséquent, il s'avère plus intéressant d'utiliser le modèle d'Armaly et Sutton a titre de comparaison pour étudier l'influence de la modélisation que nous avons développé, d'un autre coté, les viscosité des espèces sont toujours calculées par le modèle de Blottner dont le domaine de validité s'étend jusqu'à 10000°K (voir section 4.4.1).

Armaly et Sutton proposent également une détermination de la conductivité du mélange au moyen d'une loi similaire à celle utilisée pour la viscosité (section 4.4.2) . Une légère différence dans le traitement de la contribution des degrés de liberté internes pour la conductivité des espèces conduit à des nombre de Prandtl très sous-estimés à basses températures pour l'air non dissocié ($Pr = 0.66$ au lieu de la valeur usuelle de 0.725). par contre la correction apportée par Eucken a conduit à un Pr légèrement sur – estimés (0.737 , section 4.4.2.2) . La contribution des degrés de liberté internes n'intervenant par sur les espèces monoatomiques, cette sous - estimation aura peu d'influence en paroi non catalytique (écoulement dissocié) . En revanche, pour une paroi totalement catalytique (écoulement recombinaé), on, prévoit une assez forte influence.

Enfin, l'hypothèse d'un nombre de Lewis constant étant aussi a prendre sous réserve. La procédure suivit dans cette étude a été de calculer le coefficient de diffusion binaire D_{12} par le modèle de Straub (atome – molécule) (voir section 4.4.2.3). Le nombre de Lewis ainsi obtenu et une fonction de la température et des fractions massiques.

Pour le cas $M_\infty = 25.5$ (très forte température dans la couche limite) at avec les conditions de calcul du tableau 17.7, nous avons comparé d'un coté, les résultats obtenus avec le modèle de Wilke (calcul : viscosité, conductivité) et la valeur 1.2 du nombre de Lewis (calcul : coefficient de diffusion binaire D_{12}) et d'un autre coté, avec celui d'Armaly et Sutton pour la viscosité et la conductivité et celui de Straub pour le calcul du coefficient de diffusion binaire.

Tableau 17. 7: modélisation choisie pour la comparaison des modèles de diffusion

Paramètres de calcul		
$Le = 1.2$	λ : Wilke, Eucken	μ : Wilke, Blottner
Modèle thermodynamique Trans – Rot - Vib	ω_I : Park	Paroi catalytique ou non

Les figures 17.27, 17.28 et 17.29 donnent les profils de température, de fraction massique et de vitesse tangentielle près de la paroi. Les profils sont assez semblables, les gradients à la paroi diffèrent légèrement.

En paroi non catalytique, les flux de chaleur sont presque identiques tandis qu'en paroi totalement catalytique, le modèle d'Armaly et Sutton conduit à des flux de chaleur jusqu'à 7.5% supérieur (voir figure 17.30). Cette augmentation peut être due à la sous-estimation du nombre de Prandtl par ce modèle.

Pour les cas d'application étudiés ici, pour lesquels la température dans la couche limite ne dépasse pas 7500°K et où le phénomène de l'ionisation n'est pas pris en considération dans les calculs, le modèle de comparaison d'Armaly et Sutton mis en œuvre dans recherche donne des résultats comparables à celui de Wilke pour le calcul de la viscosité du mélange. Nous pouvons dire aussi qu'une détermination très précise des flux de chaleur en paroi totalement catalytique imposerait un calcul exact de la contribution des degrés de liberté internes.

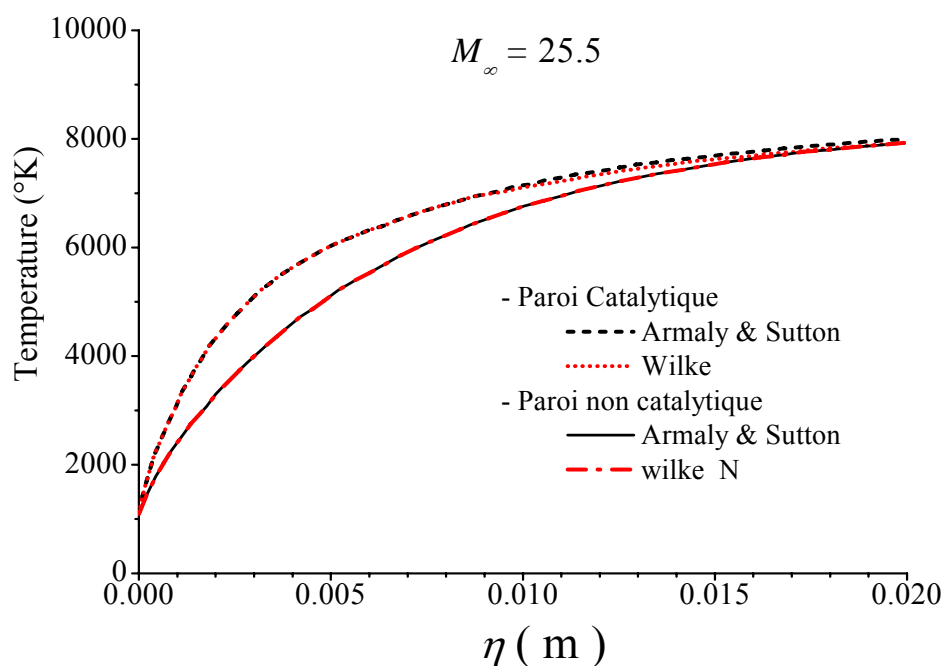


Figure 17. 27 : Profils de température sur la ligne de symétrie : influence des modèles de diffusion, hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$

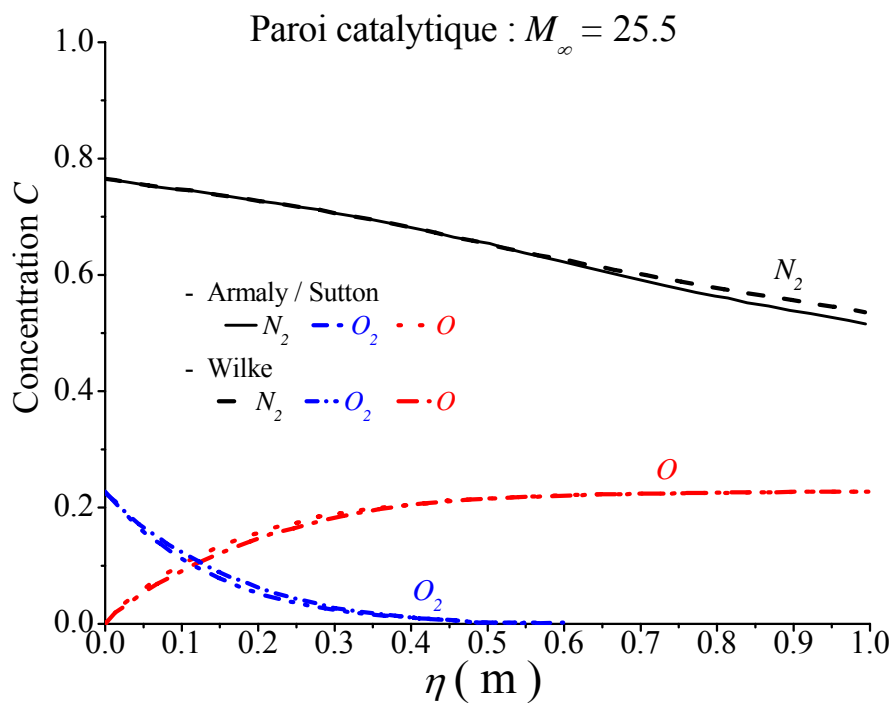


Figure 17. 28 : Profils de fractions massiques sur la ligne de symétrie : influence des modèles de diffusion, hyperboloïde, $M_\infty = 25.5$

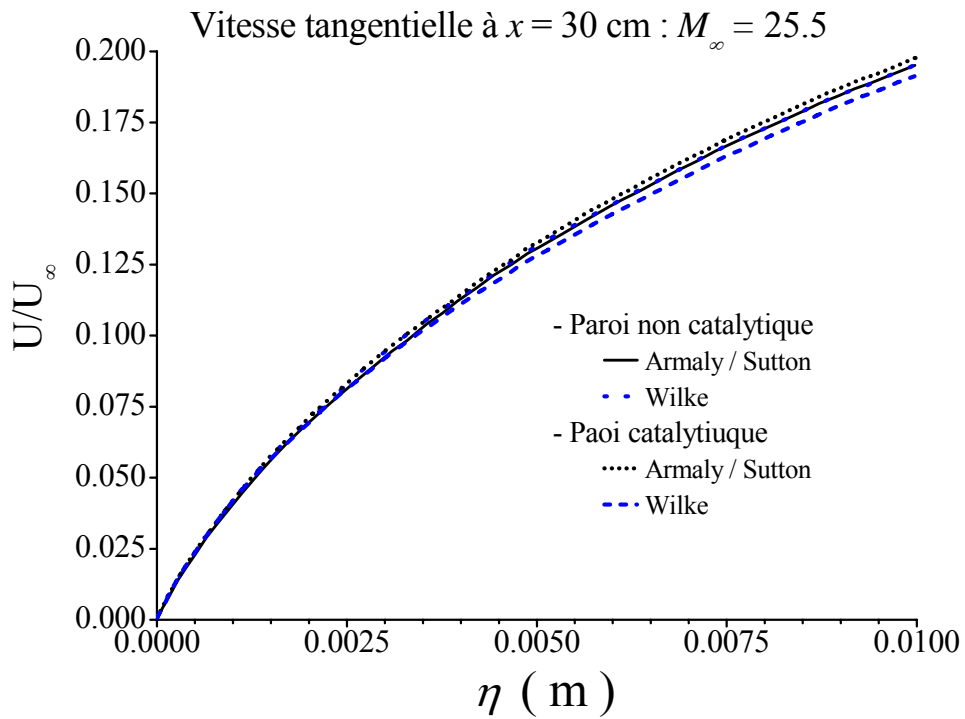


Figure 17. 29 : Profils de vitesse tangentielle en $x = 30$ cm : influence des modèles de diffusion , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$

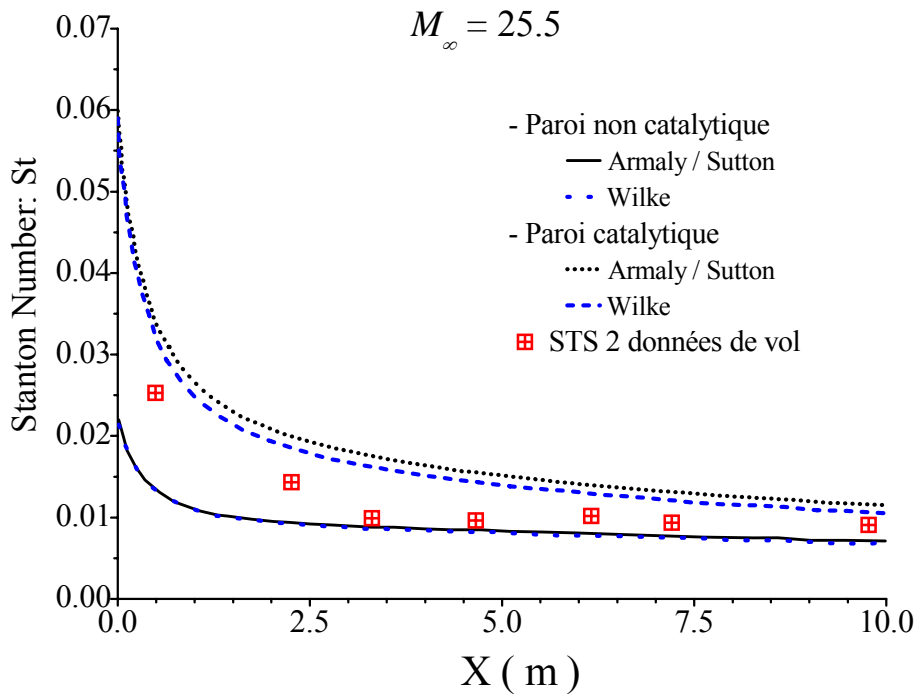


Figure 17. 30 : Nombre de Stanton pariétal : influence du modèle chimique , hyperboloïde , $M_\infty = 25.5$

Chapitre 18

18. Convergence

Dans ce chapitre, nous décrivons la procédure utilisée pour accélérer la convergence de la méthode et nous l'illustrons par quelques résultats typiques de convergence sur les cas dit de test présentés dans le chapitre précédent plus spécifiquement ceux qui correspondent à l'étude de l'écoulement sur un hyperboloïde. Cependant nous allons commencer par une introduction descriptive assez succincte sur la mise en œuvre informatique de la méthode numérique ainsi que quelques éléments significatifs concernant les états de performance du code de calcul élaboré.

18.1. Aspect informatique

Le programme de calcul que nous avons élaboré est écrit évidemment en langage Fortran (Visual Fortran .5) et comprend un nombre total de 4500 lignes. Pour assurer une bonne souplesse et maniabilité lors de son exécution, il est découpé en une quinzaine de sous programmes (subroutines). Et d'une manière plus claire, avons – nous séparé :

- Le calcul des variables et l'inversion de la loi $e(T)$
- Le calcul des moyennes de Roe dans chaque direction d'espace
- Le calcul des termes de convection dans chaque direction d'espace
- Le calcul des termes visqueux
- Le calcul des termes de production chimique
- La procédure d'inversion

L'exécution du programme a été effectuée sur un Pentium 4 dual core 3.06Ghz. la procédure d'inversion a requit environ 60% du temps d'exécution par balayage et par point de maillage . le calcul des termes de production chimique est aussi très lourd puisqu'il a représenté 20% du temps total. Enfin, le calcul des termes de convection a été estimé à 10% du temps CPU et la procédure d'inversion de la loi $e(T)$ 5%.

Typiquement, pour un maillage de 130 x 70 points, le nombre de balayages nécessaire pour atteindre la convergence appropriée est de l'ordre de 1000 (soit 500 balayage entre l'aller et le retour du domaine de calcul) Pour un tel maillage on obtient alors un temps de calcul net d'à peu près de 4heures et 30 minutes sur le type de micro ordinateur cité précédemment.

18.2. Convergence

Une étude effectuée pour un gaz parfait ou à l'équilibre chimique [74] et [73] a montré que l'emploi d'un pas de temps local permettait une nette amélioration de la vitesse de convergence. La même procédure est testée dans notre cas pour un écoulement réactif sur un hyperboloïde et est comparée à une méthode employant un pas de temps uniforme. Dans ce contexte, nous allons décrire succinctement chacune de ces procédures avant de présenter les résultats obtenus.

18.2.2. Description des procédures utilisées

- Utilisation d'un pas de temps local

Nous allons en premier lieu exposer le principe général de la méthode [74]. Selon les cas tests et pour l'application à des écoulements réactifs, des adaptations sont ensuite effectuées.

A partir de la solution initiale (section 13.2.3), on effectue une première série d'itérations (une itération = balayage aller-retour du domaine de calcul) de manière à ce que la solution s'établisse à peu près. Lors de ces itérations, on prend un paramètre de correction entropique δ_1 (voir relation (13.9)) constant dans tout le domaine et d'une valeur égale à environ 0.6. Un pas de temps local est utilisé, défini en chaque point du maillage par :

$$\Delta t_{i,j}|_{local} = \frac{CFL}{\max\left(\left|grad\xi\right|_{i,j}(c_{i,j} + V_{\xi,j}), \left|grad\eta\right|_{i,j}(c_{i,j} + V_{\eta,j})\right)} \quad (18.1)$$

Où V_ξ (resp. V_η) est le module de la vitesse dans la direction ξ (resp. η).

Pour accélérer la convergence, la valeur du CFL varie de façon inversement proportionnelle au résidu $R^n = \sqrt{\sum_{i,j} |R_{i,j}^n|^2}$ où $R_{i,j}^n$ est donné par la relation (13.15).

En gaz parfait, la valeur du CFL peut donc varier d'une valeur initiale de 5 jusqu'à une valeur de 1500.

Cette procédure permet de mettre rapidement la solution en place, mais d'une part les grandes valeurs du CFL introduisent généralement des oscillations au voisinage de l'onde de choc et d'autre part la valeur $\delta_1 = 0.6$ est trop élevée pour avoir une détermination correcte des grandeurs dans la couche limite. En utilisant la solution précédente comme solution initiale, on effectue un second calcul en prenant une valeur variable du paramètre δ_1 ; sur cinq points autour de l'onde de choc on prend $\delta_1 = 0.6$ et partout ailleurs on prend $\delta_1 = 10^{-4}$. De plus, on introduit une limitation non seulement sur la valeur du CFL au voisinage de l'onde de choc

(CFL_{choc}) mais encore sur les écarts qui existent sur les pas de temps locaux. Ainsi le pas de temps $\Delta t_{i,j}$ en chaque point de maillage est donnée par :

$$\Delta \tilde{t}_{i,j} = \min(\Delta t_{i,j}, \Delta t_{choc}) \quad (18.2)$$

Où $\Delta t_{i,j}$ est déterminé par la relation (18.1) et Δt_{choc} est la valeur minimale du pas temps au voisinage du choc, calculé par la formule (18.1) en remplaçant CFL par CFL_{choc} .

- Utilisation d'un pas de temps uniforme

Nous présentons maintenant la procédure utilisant un pas de temps uniforme.

A partir de la solution initiale définie au paragraphe 13.2.3 effectue une première série d'itération en en prenant pour le paramètre de correction entropique δ_1 une valeur assez élevée (de l'ordre de 0.6) et uniforme dans tout le domaine de calcul (voir relation (13.9)) . Le pas de temps et uniforme et déterminé a partir de la relation 13.17 que nous rappelons ci-dessous :

$$\Delta t|_{uniforme} = \min_{i,j} \left\{ \frac{CFL}{\max \left(|grad \xi|_{i,j} (c_{i,j} + V_{\xi,j}), |grad \eta|_{i,j} (c_{i,j} + V_{\eta,j}) \right)} \right\} \quad (18.3)$$

Où V_{ξ} (resp. V_{η}) est le module de la vitesse dans la direction ξ (resp. η).

Une valeur du nombre CFL de l'ordre de 25 est utilisée. Après cette première série d'itérations. le choc détaché est formé et l'on peut alors utilisé un paramètre ξ_1 non uniforme. Sa valeur est fixée à 10^{-1} dans tout le domaine de calcul excepté au voisinage du choc détaché (sur environ cinq points de maillage) où elle est maintenue a 0.6. On effectue alors une nouvelle série d'itération (à partir de la solution obtenue à l'issue du premier calcul) jusqu'à convergence en doublant la valeur du CFL toutes les 25 itérations jusqu'à une valeur maximale comprise entre 200 et 300 selon les cas.

18.2.3. Application à un écoulement réactif

Les deux procédures ont été testées dans un premier temps pour un écoulement réactif autour d'un hyperboloïde à $M_{\infty} = 9.15$ avec maillage de 130 x 70 points.

- Pas de temps local

Dans la procédure faisant appel à un pas de temps local et lors la première série de balayage, le paramètre $\delta_1 = 0.8$ pour stabiliser le calcul, le CFL initial valant 2. la variation du CFL avec le résidu a également du être limitée ,pour éviter des variations trop brutales ; le CFL ne pouvant augmenter au maximum que de 1.2 fois sa valeur actuelle . De même une valeur limite de $CFL = 200$ a été introduite ; au delà de cette valeur le calcul peut diverger. La valeur du nombre CFL

(inversement proportionnelle au résidu), et par conséquent la valeur des pas de temps Δt_{ij} , a été recalculer toutes les trois itérations. La première série comprenait 200 itérations au cours desquelles le résidu de l'équation d'énergie a perdu quatre ordres de grandeur.

Pour la seconde série de balayages, la valeur du CFL été égale à 50 et celle du CFL_{choc} à 10. le paramètre δ_1 valais 0.7 autour de l'onde de choc et 10^{-4} ailleurs. On a tout d'abord effectué 300 itérations puis 250 autres itérations. la figure 18.1 retrace l'historique de la convergence ; on remarque que le résidu de l'équation d'énergie a perdu 5 ordres de grandeur au bout de 500 itérations mais atteint en suite un seuil.

Sur la figure 18.2 est présentée l'évolution du nombre de Stanton à la paroi (sa définition est donné dans le paragraphe 16.1.3) suivant le nombre total d'itérations effectuées. La forte valeur de δ_1 pendant les deux cents premières itérations a bien contribué a mettre la solution en place mais entraîne une mauvaise détermination des grandeurs dans la couche limite. Au bout de 500 itérations, la solution n'est pas encore complètement convergée dans la couche limite et il faut atteindre plus de 750 itérations pour se rapprocher nettement de la solution convergée laquelle est obtenue après 1000 itérations avec la procédure utilisant un pas de temps uniforme.

- Pas de temps uniforme

Une comparaison avec un pas de temps uniforme est effectuée. La procédure décrite dans le paragraphe 18.2.1 a été suivie avec une valeur maximale de 300 pour le CFL . la courbe de convergence est dessinée sur la figure 18.3. comparativement, la décroissance du résidu est moins forte qu'avec un pas de temps local des 200 première itérations (dans ce cas il perd trois ordres de grandeurs). Toutefois, les fortes valeurs du nombre CFL et la prise en compte d'un paramètre δ_1 variable au bout de 50 itérations, permettent une convergence rapide de la solution dans l'ensemble du domaine de calcul. La figure 18.4 donne le nombre de Stanton à la paroi à 250,500 et 750 itérations. On remarque que la convergence est atteinte au bout de 500 itérations.

En conclusion on peut dire que dans le cas d'écoulements réactifs, des modifications dans la procédure générale exposée dans le cas d'utilisation d'un pas de temps local (notamment l'augmentation du paramètre δ_1 et la limitation du nombre CFL) ont été nécessaires pour stabiliser le calcul. Ceci peut être expliquer par l'apparition de solutions non physique en coure de résolutions, liée au pas d'avancement locale de la solution. Ces modifications, associées à d'éventuels problèmes d'ajustement de la valeur CFL_{choc} , ont entraîné une dégradation des performances de cette procédure qui n'a pas montré d'amélioration de la vitesse de convergence par rapport à la procédure utilisant un pas d'avancement uniforme.

De ce fait, l'utilisation d'un pas de temps uniforme a été préféré. La procédure a été testée pour un nombre de Mach $M_\infty = 25.5$ et n'a pas mis en évidence de problème particulier comme le montrent les résultats ci-dessous. L'historique de convergence avec l'utilisation d'un pas de temps uniforme ainsi que le nombre de Stanton pariétaux au bout de 250,500 et 750 itérations sont données sur les figures 18.5 et 18.6. la convergence est atteinte au bout de 500 itérations.

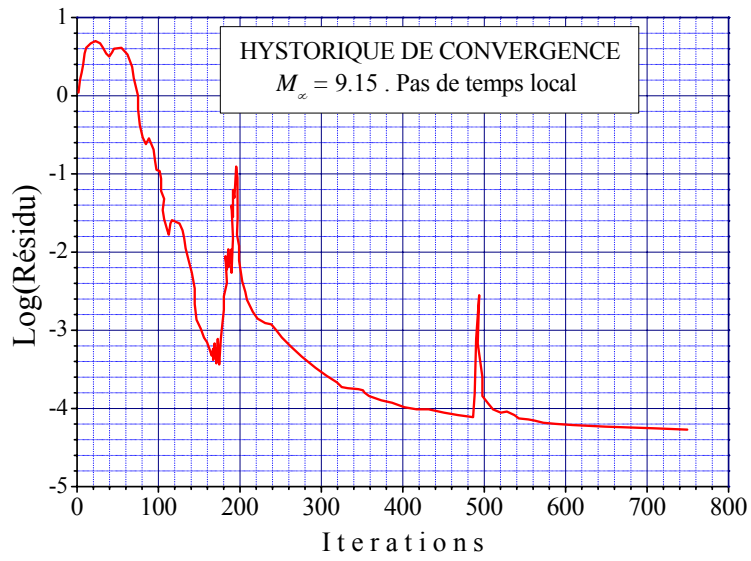


Figure 18. 1 : Convergence : pas de temps local, hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$

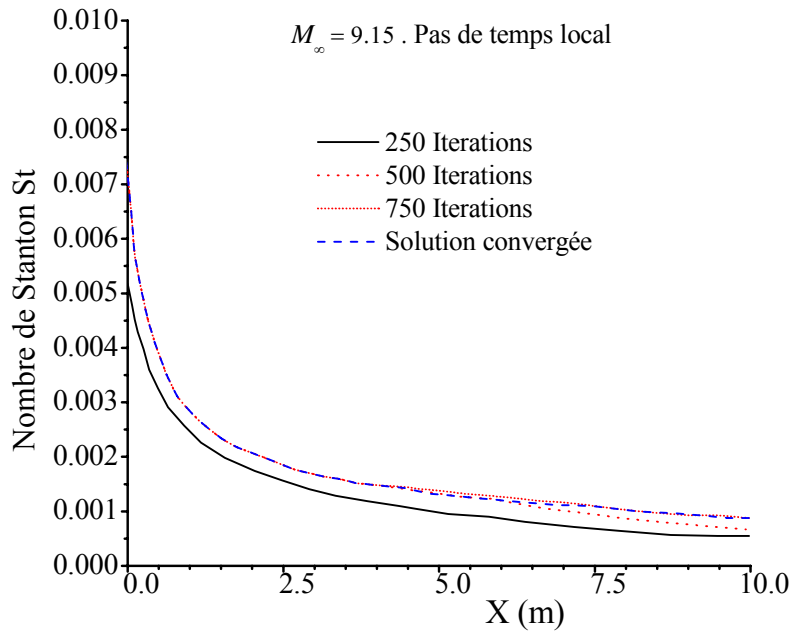


Figure 18. 2 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps local, Hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$

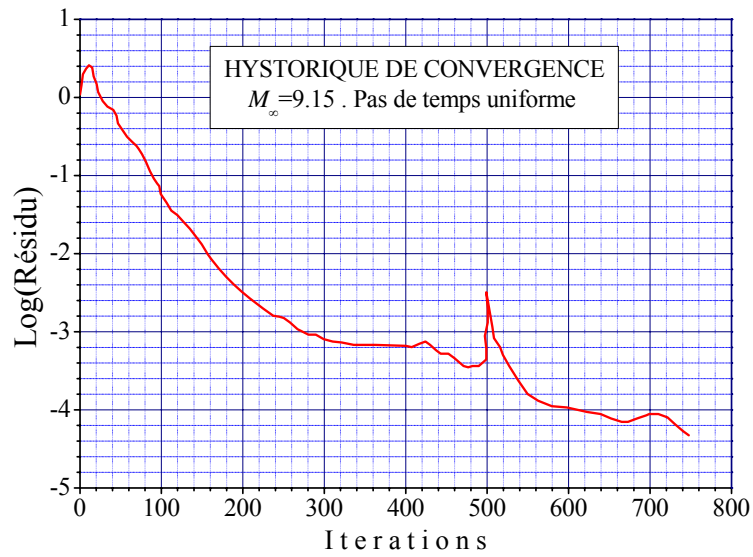


Figure 18. 3 : Convergence : pas de temps uniforme, hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$

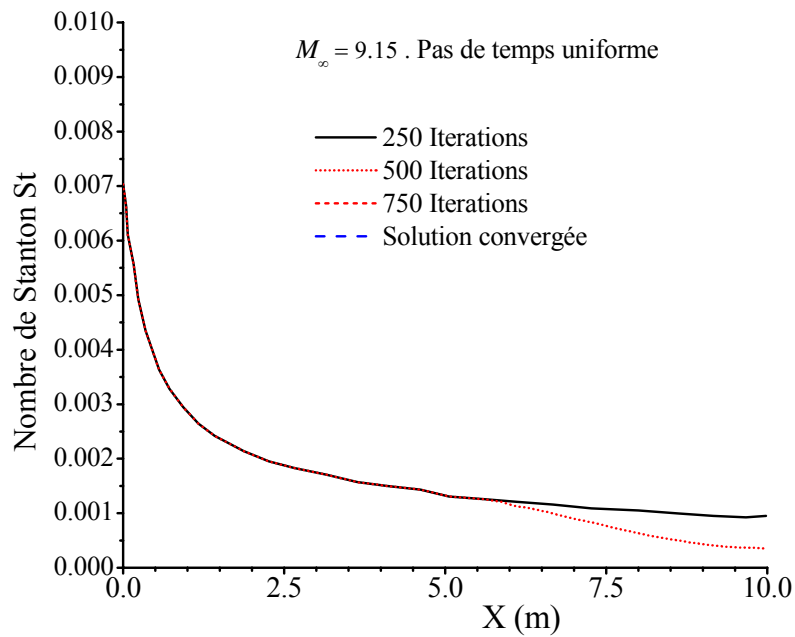


Figure 18. 4 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps uniforme, Hyperboloïde à $M_\infty = 9.15$

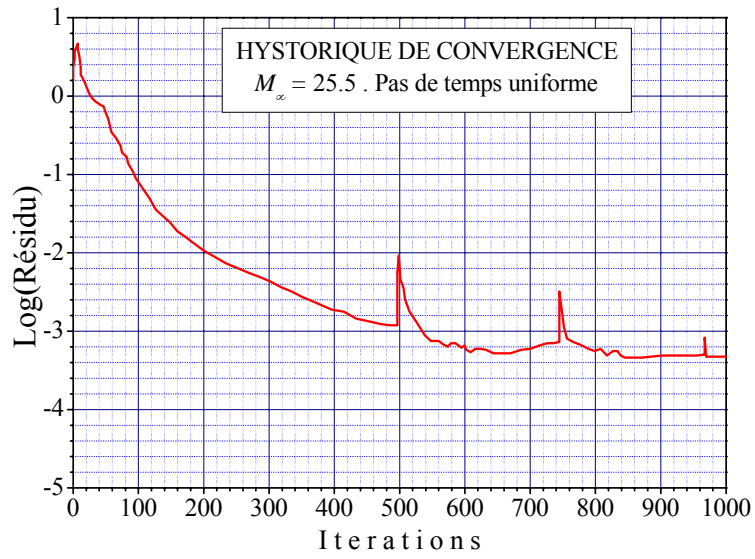


Figure 18. 5: Convergence : pas de temps uniforme, hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$

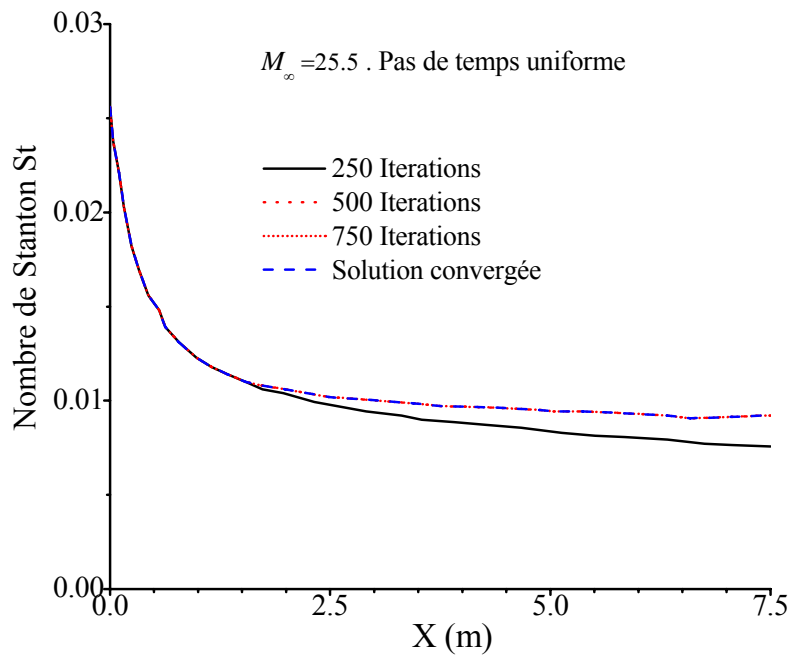


Figure 18. 6 : Nombre de Stanton pariétal, pas de temps uniforme, Hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$

Conclusion

Les travaux effectués dans le cadre de cette thèse concernent la simulation d'écoulements hypersoniques visqueux bidimensionnels (plans ou axisymétriques).

Le cadre de l'étude a d'abord été posé, accompagné d'une discussion des hypothèses retenues. L'air est ainsi assimilé à un gaz composé de cinq espèces (azote et oxygène moléculaire ou atomique et monoxyde d'azote) en éventuel déséquilibre chimique. Les phénomènes d'ionisation et de radiation sont exclus et il est admis que l'équilibre thermique est réalisé. Ces hypothèses permettent de prendre en considération la plupart des phénomènes intervenant lors de la rentrée atmosphérique, pour des altitudes comprises entre 80 et 40 km environ. La modélisation adoptée conduit aux équations de Navier - Stokes étendues à un mélange de gaz réactif. D'autre part, les écoulements étudiés présentent une direction privilégiée parallèle à la paroi, suivant laquelle les gradients visqueux sont faibles; en conséquence, l'approximation dite de couches mince a été également introduite.

Pour fermer le système d'équation ainsi obtenu, des relations supplémentaires sont nécessaires. La représentation thermodynamique de l'air a été ainsi discutée : deux représentations différentes sont finalement utilisées. La première d'entre elles ne tient compte que des degrés de liberté de translation pour les atomes et de translation, rotation et vibration pour les molécules. La seconde, plus complète, prend de plus en compte l'excitation électronique, l'anharmonicité et le couplage entre la rotation et la vibration.

L'étude de l'influence du choix de la représentation thermodynamique, effectuée sur des écoulements autour d'hyperboloïdes à $M_\infty = 25.5$ et $M_\infty = 9.15$, n'a pas mis en évidence de différences significatives entre ces deux modélisations. La représentation la plus complète conduit à des niveaux de températures inférieures derrière l'onde de choc, l'écoulement étant alors moins dissocié et l'onde de choc se rapprochant de la paroi. Une troisième représentation très simplifiée, puisque ne tenant pas compte de la vibration, a aussi été testée : les températures immédiatement derrière l'onde de choc sont nettement supérieures mais la dissociation moléculaire les abaisse et on retrouve rapidement, dans la couche de choc, le même niveau de température que celui donné par les deux autres modèles. Par rapport au deux premières représentations, l'onde de choc est alors plus éloigné de la paroi. Les grandeurs pariétales sont identiques pour les deux premières modélisations, la représentation très simplifiée conduisant, quant à elle, à des flux de chaleur et des coefficients de frottement légèrement inférieure.

L'étude de la modélisation des termes de diffusion a ensuite été abordée ; une loi de Fick est adoptée pour le flux de diffusion massique et l'hypothèse d'un nombre de

CONCLUSION

Lewis constant est faite. La viscosité et la conductivité sont prescrites par la formule de Wilke : la viscosité des espèces est donnée par le modèle de Blottner et la correction d'Eucken est appliquée pour la conductivité des espèces.

Un modèle plus complet, développé par Armaly et Sutton a aussi été testé dans le cas de l'écoulement autour de l'hyperboloïde à $M_\infty=25.5$ et n'a pas entraîné de modifications majeures de la solution. Il est prouvé en effet que le modèle de Wilke donne des résultats satisfaisants jusqu'à des températures d'environ 7500 °K, ce qui entre dans les limites de notre étude. Toutefois, en cas d'extension de la présente méthode à des écoulements ionisés, la formulation de Wilke doit être abandonnée au profit par exemple de celle d'Armaly et Sutton.

L'influence du choix du modèle pour la cinétique chimique a été ensuite discutée. Nous avons insisté sur les difficultés rencontrées pour la détermination expérimentale des vitesses de réaction et sur les larges différences pouvant exister entre les modèles. Les modèles proposés par Park et Gardiner ont été comparés. D'une façon générale, les vitesses de réactions calculées avec le modèle de Park sont plus rapides. Cette observation est compatible avec les résultats obtenus pour des écoulements autour d'hyperboloïdes à $M_\infty = 25.5$ et $M_\infty = 9.15$: une augmentation des vitesses de réaction se traduit par des niveaux de températures inférieures, l'onde de choc se rapprochant sensiblement de la paroi. Le modèle de Gardiner prédit des flux de chaleur et coefficients de frottement légèrement supérieurs.

Les conditions aux limites de la paroi ont été décrites en insistant plus particulièrement sur les phénomènes de catalyse. Le cas de paroi totalement catalytique ou non catalytique a été étudié. Pour un écoulement en fort déséquilibre chimique en début de rentrée atmosphérique par exemple, à $M_\infty = 25.5$, une paroi totalement catalytique entraîne un accroissement du flux de chaleur à la paroi dans un facteur 2.5 par rapport à la paroi non catalytique. En fin de rentrée atmosphérique, à $M_\infty = 9.15$, la prédiction des flux de chaleurs pariétaux ne fait plus apparaître d'influence du pouvoir catalytique de la paroi. Par rapport à ce point précis, nous avons mis en évidence l'influence du pouvoir catalytique de la paroi, qui est de loin le paramètre le plus important qui détermine le flux de chaleur que doit supporter la paroi. Si la paroi est non catalytique, elle est beaucoup moins sollicitée que si elle est catalytique.

La température de paroi a une influence visible aux basses altitudes si l'écoulement n'est pas très chaud par rapport à la paroi. En revanche aux hautes altitudes où la paroi reste beaucoup plus froide que l'écoulement, la température de paroi n'a presque pas d'influence.

Le modèle de réactions chimiques peut avoir une grande influence sur les prévisions de l'écoulement, si la paroi est non catalytique. En concordance avec ce travail, nous avons pu tester plusieurs modèles de vitesses de réactions. Nous avons en plus analysé la contribution de chaque réaction dans un jeu complet de réactions et avons pu séparer les réactions dominantes. Ainsi, nous avons montré que pour un calcul plus allégé on peut obtenir des prévisions satisfaisantes en ne prenant en compte qu'un nombre réduit de réactions chimiques. Il faut noter que le temps de calcul est proportionnel au nombre de réactions utilisées.

La deuxième partie de cette étude concerne l'emploi de schémas de type TVD pour la simulation numérique d'écoulement réactifs. Ces schémas ont d'abord été présentés dans le cadre d'une équation scalaire. Leur extension aux équations d'Euler pour un mélange de gaz réactifs est réalisée par l'intermédiaire du solveur approché du problème de Riemann proposé par Roe et étendu par Montagné et Vinokur à un mélange de gaz réactif. Une étude comparative de différentes variantes de schémas TVD (schémas décentrés upwind de Harten –Yee, schémas décentrés de Yee-Roe-Davis) a été effectuée dans le cas monodimensionnel pour un mélange de gaz (inertes ou réactifs) dans un tube de choc. Cette étude met en évidence un bon comportement général des schémas de type TVD pour la simulation d'écoulements réactifs ; en particulier, la capture de l'onde de choc et la détermination du faisceau de détente sont réalisées de manière très satisfaisante. Deux difficultés sont néanmoins apparues :

- La première concerne l'apparition d'une oscillation des profils de pression ou de vitesse au niveau de la discontinuité de contact : cette oscillation, est présente aussi bien dans le cas d'un mélange de gaz inertes que réactifs, est attribuée à la détermination de la valeur de la pression dans l'état moyen de Roe.
- Une deuxième difficulté, propre au calcul d'écoulements réactifs, est liée à la présence d'un pic sur les fractions massiques de monoxyde d'azote et d'azote moléculaire au voisinage de la discontinuité de contact : ce pic est expliqué par l'étalement numérique de la discontinuité de contact qui entraîne l'apparition de températures intermédiaires non physiques pour lesquelles le monoxyde d'azote est stable.

Une autre problématique de la méthode concerne le traitement implicite en temps des équations. Une méthode entièrement couplée préférée pour des raisons de stabilité et d'efficacité. De ce point de vue, il est apparu que, dans le cas d'écoulements en fort déséquilibre chimique, l'utilisation de pas de temps uniforme permettait une convergence plus rapide vers la solution stationnaire cherchée par rapport à l'emploi d'un pas de temps local. Typiquement, pour un écoulement autour d'un hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$, avec un maillage comprenant 130×70 points, la solution après convergence est obtenue après environ 500 itérations, soit un temps de calcul d'environ quatre heures trente minutes sur un microordinateur du type Pentium 4 à 3.06 GHz assez enrichi dans sa composition hardware.

Une série de cas tests sur une variété de configurations géométriques a permis la validation de la méthode d'investigation de phénomènes physiques dus au déséquilibre chimique des écoulements. En particulier, l'étude des écoulements sur une sphère à $M_\infty = 15.3$ et sur un hyperboloïde à $M_\infty = 25.5$ a aussi permis une comparaison approfondie des résultats obtenus d'une part avec la présente méthode et d'autre part avec une méthode de couplage au deuxième ordre des équations de Euler et des équations de couche limite. La présente méthode a également permis le calcul d'écoulements complexes en fort déséquilibre chimique tel que l'écoulement à $M_\infty = 25$ autour d'une double ellipse, où la confrontation des résultats avec d'autres résultats numériques s'est avérée satisfaisante. Enfin, l'étude de l'écoulement sur une plaque plane a permis d'illustrer les phénomènes de relaxation vers l'équilibre le long de la plaque pour différents types de régime d'écoulement en amont de la plaque (depuis un écoulement presque figé jusqu'à un écoulement en quasi équilibre chimique). La

CONCLUSION

dépendance vis-à-vis de la pression des temps caractéristiques associés aux phénomènes de dissociation chimique a clairement été mise en évidence.

Les perspectives d'amélioration de la méthode présentée dans cette thèse afin de mieux simuler les phénomènes rencontrés lors d'une rentrée atmosphérique concernent les deux parties de l'étude : modélisation et aspects numériques.

Du point de vue modélisation, le domaine de validité de la méthode pourrait être étendu en prenant en compte dans un premier temps les effets de déséquilibre thermique puis ceux de l'ionisation. Cette extension doit s'accompagner d'une remise en cause des hypothèses de diffusion. De plus, la prise en compte de différentes températures complique quelque peu le calcul des taux de production chimique : une température moyenne doit ainsi être introduite pour la détermination des vitesses de réaction. Enfin, en ce qui concerne l'ionisation, une hypothèse raisonnable consiste à assimiler l'air à un mélange de sept espèces (N_2 , O_2 , N , O , NO , NO^+ , e^-) ; le respect de la neutralité électrique permet ainsi de pas avoir à résoudre d'équation supplémentaire pour les électrons.

Quant à l'aspect numérique, des améliorations doivent être apportées au schéma de discrétisation de manière en particulier à mieux tenir compte des effets dus à la présence dans le système d'équations de termes sources fortement non linéaire. La présence de tels termes sources entraîne en effet des modifications sensibles des propriétés de la solution du problème continu (variation totale de la solution non décroissante, courbes caractéristique non rectilignes, solution non constante le long des caractéristiques, etc...) dont les schémas actuels ne tiennent guère compte. Un autre effet de la présence de termes sources non linéaires est la possibilité pour le problème discret d'exhiber une variété de solutions parasites (d'origine purement numériques). de ce fait des efforts sont donc nécessaires :

- pour développer de nouveaux schémas capables de réaliser au mieux le couplage entre le terme source et la partie homogène des équations.
- pour mettre au point des stratégies efficaces de contrôle d'erreur en liaison avec l'évolution et le contrôle des pas de temps ou d'espace.

ANNEXES

Annexe A

Définitions des diverses constantes

A.1 Constituants de l'air

	N_2	O_2	N	O	NO
$M_i^* (Kg)$	$28.0134 \cdot 10^{-03}$	$31.9988 \cdot 10^{-03}$	$14.0067 \cdot 10^{-03}$	$15.9994 \cdot 10^{-03}$	$30.0061 \cdot 10^{-03}$
$e_i^{*0} (J.Kg^{-1})$	0.	0.	$33.55 \cdot 10^{06}$	$15.46 \cdot 10^6$	$2.99 \cdot 10^{06}$
$\theta_{vl}^* (K)$	3390.	2270.	0.	0.	2740.
a_1^*	3.1537	3.2670	2.4957	2.6428	3.2374
	7.7777	2.2893	1.3388	2.3584	5.7368
a_2^*	$9.9452 \cdot 10^{-04}$	$1.1324 \cdot 10^{-03}$	$2.3583 \cdot 10^{-05}$	$-1.7596 \cdot 10^{-04}$	$1.0949 \cdot 10^{-03}$
	$-1.1912 \cdot 10^{-03}$	$6.7967 \cdot 10^{-04}$	$4.2074 \cdot 10^{-04}$	$8.8833 \cdot 10^{-05}$	$-4.6021 \cdot 10^{-04}$
a_3^*	$-2.4649 \cdot 10^{-07}$	$-2.7934 \cdot 10^{-07}$	$-2.3125 \cdot 10^{-08}$	$6.0750 \cdot 10^{-08}$	$-3.0406 \cdot 10^{-07}$
	$1.2541 \cdot 10^{-07}$	$-2.3506 \cdot 10^{-07}$	$-2.9324 \cdot 10^{-08}$	$-9.4390 \cdot 10^{-09}$	$5.2982 \cdot 10^{-08}$
a_4^*	$2.0863 \cdot 10^{-11}$	$2.5253 \cdot 10^{-11}$	$6.3101 \cdot 10^{-12}$	$-5.2372 \cdot 10^{-12}$	$2.7880 \cdot 10^{-11}$
	$-3.0949 \cdot 10^{-11}$	$1.1871 \cdot 10^{-13}$	$9.1878 \cdot 10^{-13}$	$4.5843 \cdot 10^{-13}$	$-1.2892 \cdot 10^{-12}$
a_5^*	$-3.2876 \cdot 10^{-18}$	$2.0093 \cdot 10^{-17}$	$1.7852 \cdot 10^{-19}$	$-5.0993 \cdot 10^{-18}$	$5.8089 \cdot 10^{-18}$
	$-2.1690 \cdot 10^{-20}$	$-5.3044 \cdot 10^{-20}$	$4.3496 \cdot 10^{-20}$	$1.7023 \cdot 10^{-20}$	$-1.3044 \cdot 10^{-20}$
a_6^*	$-9.8236 \cdot 10^{+02}$	$-1.0243 \cdot 10^{+03}$	$5.6165 \cdot 10^{+04}$	$2.9215 \cdot 10^{+04}$	$9.8555 \cdot 10^{+03}$
	$-8.5376 \cdot 10^{+03}$	$2.8033 \cdot 10^{+03}$	$5.8083 \cdot 10^{+04}$	$2.9356 \cdot 10^{+04}$	$6.4811 \cdot 10^{+03}$

Pour les coefficients polynomiaux $a_{k,i}^*$ de chaque espèce, la rangée supérieure correspond aux températures comprises entre 300 et 5000 K et la rangée inférieure aux températures allant de 5000 K à 25000 K. [109]

A.2. Pour les termes de diffusion

Les coefficients entrant dans le modèle de Blottner [18] sont donnés ci après :

Espèce	$A_i^{\mu*}$	$B_i^{\mu*}$	$C_i^{\mu*}$
N_2	0.0268142	0.3177838	-11.315513
O_2	0.0449290	-0.0826158	-9.2019475
N	0.0115572	0.6031679	-12.4327495
O	0.0203144	0.4294404	-11.6031403
NO	0.0436378	-0.0335511	-9.5767430

A.3. Pour les taux de production

Nous donnons maintenant les coefficients intervenant dans les constantes d'équilibre chimique :

Réactions	A_1^{c*}	A_2^{c*}	A_3^{c*}	A_4^{c*}	A_5^{c*}
$O_2 \Leftrightarrow O + O$	1.335	-4.127	-0.616	0.093	-0.005
$N_2 \Leftrightarrow N + N$	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006
$NO \Leftrightarrow N + O$	1.549	-7.784	0.228	-0.043	0.002
$NO + O \Leftrightarrow N + O_2$	0.215	-3.657	0.843	-0.136	0.007
$N_2 + O \Leftrightarrow N + NO$	2.349	-4.828	0.455	-0.075	0.004

Les constantes pour les réactions directes pour le modèle de Park [97] :
 K_d^* en $m^3/mol/s$

Réactions	Catalyseur	A_c^*	B_c^*	θ_c^*
$O_2 \Leftrightarrow O + O$	N	8.250×10^{13}	-1.000	59500
	O	8.250×10^{13}	-1.000	59500
	N_2	2.750×10^{13}	-1.000	59500
	O_2	2.750×10^{13}	-1.000	59500
	NO	2.750×10^{13}	-1.000	59500
$N_2 \Leftrightarrow N + N$	N	1.110×10^{16}	-1.600	113200
	O	1.110×10^{16}	-1.600	113200
	N_2	3.700×10^{15}	-1.600	113200
	O_2	3.700×10^{15}	-1.600	113200
	NO	3.700×10^{15}	-1.600	113200
$NO \Leftrightarrow N + O$	N	4.600×10^{11}	-0.500	75500
	O	4.600×10^{11}	-0.500	75500
	N_2	2.300×10^{11}	-0.500	75500
	O_2	2.300×10^{11}	-0.500	75500
	NO	2.300×10^{11}	-0.500	75500
$NO + O \Leftrightarrow N + O_2$		2.160×10^{02}	1.290	19200
$N_2 + O \Leftrightarrow NO + N$		3.180×10^{07}	0.100	37700

ANNEXE A

Les constantes pour les réactions directes pour le modèle de Gardiner [46]:
 K_d^* en $m^3/mol/s$

Réactions	Catalyseur	A_c^*	B_c^*	θ_c^*
$O_2 \Leftrightarrow O + O$	N	1.820×10^{12}	-1.000	59380
	O	4.560×10^{13}	-1.000	59380
	N_2	3.640×10^{12}	-1.000	59380
	O_2	1.640×10^{13}	-1.000	59380
	NO	1.820×10^{12}	-1.000	59380
$N_2 \Leftrightarrow N + N$	N	1.600×10^{16}	-1.600	113200
	O	1.400×10^{15}	-1.600	113200
	N_2	3.700×10^{15}	-1.600	113200
	O_2	1.400×10^{15}	-1.600	113200
	NO	1.400×10^{15}	-1.600	113200
$NO \Leftrightarrow N + O$	N	8.000×10^{14}	-1.500	75500
	O	8.000×10^{14}	-1.500	75500
	N_2	4.000×10^{14}	-1.500	75500
	O_2	4.000×10^{14}	-1.500	75500
	NO	8.000×10^{14}	-1.500	75500
$NO + O \Leftrightarrow N + O_2$		3.800×10^{03}	1.290	20820
$N_2 + O \Leftrightarrow NO + N$		1.820×10^{08}	0.100	38370

Les constantes pour les réactions directes pour le modèle de NASA [42]:
 K_d^* en $m^3/mol/s$

Réactions	Catalyseur	A_c^*	B_c^*	θ_c^*
$O_2 \Leftrightarrow O + O$	N	3.610×10^{12}	-1.000	59400
	O	9.025×10^{13}	-1.000	59400
	N_2	7.220×10^{12}	-1.000	59400
	O_2	3.249×10^{13}	-1.000	59400
	NO	3.610×10^{12}	-1.000	59400
$N_2 \Leftrightarrow N + N$	N	4.150×10^{16}	-0.500	113100
	O	1.920×10^{11}	-0.500	113100
	N_2	4.800×10^{11}	-0.500	113100
	O_2	1.920×10^{11}	-0.500	113100
	NO	1.920×10^{11}	-0.500	113100
$NO \Leftrightarrow N + O$	N	7.940×10^{15}	-1.500	75600
	O	7.940×10^{15}	-1.500	75600
	N_2	3.970×10^{14}	-1.500	75600
	O_2	3.970×10^{14}	-1.500	75600
	NO	7.940×10^{15}	-1.500	75600
$NO + O \Leftrightarrow N + O_2$		3.750×10^{07}	0.500	37500
$N_2 + O \Leftrightarrow NO + N$		3.180×10^{03}	0.000	38000

ANNEXE A

Les constantes pour les réactions directes pour le modèle de Straub [126]:
 K_d^* en $m^3 / mol / s$

Réactions	Catalyseur	A_c^*	B_c^*	θ_c^*
$O_2 \Leftrightarrow O + O$	N	1.200×10^{15}	-0.500	59380
	O	2.100×10^{12}	-0.500	59380
	N_2	1.200×10^{15}	-0.500	59380
	O_2	3.600×10^{15}	-0.500	59380
	NO	1.200×10^{15}	-0.500	59380
$N_2 \Leftrightarrow N + N$	N	1.500×10^{16}	-0.500	113260
	O	9.900×10^{14}	-1.500	113260
	N_2	3.000×10^{15}	-1.500	113260
	O_2	9.900×10^{14}	-1.500	113260
	NO	9.900×10^{14}	-1.500	113260
$NO \Leftrightarrow N + O$	N	5.200×10^{15}	-1.500	75600
	O	5.200×10^{15}	-1.500	75600
	N_2	5.200×10^{15}	-1.500	75600
	O_2	5.200×10^{15}	-1.500	75600
	NO	5.200×10^{15}	-1.500	75600
$NO + O \Leftrightarrow N + O_2$		1.000×10^{07}	0.500	3120
$N_2 + O \Leftrightarrow NO + N$		5.000×10^{03}	0.000	38000

A.4. Trajectoire de rentrée STS-2 et corps axisymétrique équivalent:

t (s)	H (Km)	U_∞ (km/s)	ρ_∞ (kg/m ³) x 10 ⁻⁶	P_∞ (atm) x 10 ⁻⁶	T_∞ (°K)	M_∞ Mach	α_{incid} (°)	Body équivalent	
								Half angle Asymptote Summit (°)	Noze Radius (m)
200	92.35	7.50	2.184	1.128	324	27.90	40.4	41.15	1.296
250	85.74	7.53	6.365	3.587	199	26.60	41.0	41.70	1.322
330	77.91	7.42	2.335	13.161	199	26.30	40.2	40.80	1.286
460	74.98	7.20	3.815	21.426	198	25.50	40.0	40.75	1.276
480	74.62	7.16	4.055	22.804	198	25.40	40.3	41.00	1.289
540	73.33	7.03	4.794	28.312	200	24.80	40.4	41.10	1.295
650	71.29	6.73	6.824	39.654	205	23.40	39.4	40.20	1.253
770	68.67	6.31	9.669	59.923	219	21.30	38.5	39.20	1.207
830	66.81	6.05	1.216	79.251	230	19.90	41.4	42.20	1.342
1 000	60.56	4.99	2.621	187.76	253	15.70	42.0	42.75	1.368
1 120	52.97	3.87	6.762	502.54	262	11.90	38.3	39.00	1.204
1 215	47.67	2.93	1.344	990.01	260	9.15	34.8	35.50	1.056
1 270	45.10	2.49	1.907	1394	258	7.74	32.9	33.60	0.973
1 295	43.10	2.29	2.478	1791	253	7.19	30.1	30.80	0.851
1 320	41.50	2.27	3.399	2388	248	6.74	28.0	28.90	0.752

L'origine des temps au \leftrightarrow passage à $4 \cdot 10^5$ ft (≈ 120 Km), début du régime continu [42]

Annexe B

Calcul de l'équilibre chimique pour l'air

On suppose que la température et la pression sont données et on se propose de calculer la composition de l'air à l'équilibre chimique pour les espèces N_2 , O_2 , N , O , et NO rangées dans cet ordre. On considère pour ce cas les trois réactions chimiques suivantes :



Pour lesquelles les trois constantes d'équilibre sont données en fonction de la température (Modèle de Park par exemple) pour les variables sans dimension, puis sans dimension, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 K_{1eq}^*(T^*) &= \frac{\rho_4^{*2}}{M_4^{*2}} \frac{M_2^*}{\rho_2^*} = \frac{\rho_\infty M_2^*}{M_4^{*2}} \left(\frac{\rho_4^2}{\rho_2} \right) \\
 K_{2eq}^*(T^*) &= \frac{\rho_3^{*2}}{M_3^{*2}} \frac{M_1^*}{\rho_1^*} = \frac{\rho_\infty M_1^*}{M_3^{*2}} \left(\frac{\rho_3^2}{\rho_1} \right) \\
 K_{3eq}^*(T^*) &= \frac{\rho_3^* \rho_4^*}{M_3^* M_4^*} \frac{M_5^*}{\rho_5^*} = \frac{\rho_\infty M_5^*}{M_3^* M_4^*} \left(\frac{\rho_3 \rho_4}{\rho_1} \right)
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Soit de façon plus compacte

$$\begin{aligned}
 \frac{\rho_4^2}{\rho_2} &= K_{1eq} \\
 \frac{\rho_3^2}{\rho_1} &= K_{2eq} \\
 \frac{\rho_3 \rho_4}{\rho_5} &= K_{3eq}
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

D'autre part, la conservation des proportions initiales d'éléments atomiques oxygène et azote conduit à :

$$\rho_1 = \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} \rho_2 - \rho_3 + \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} \rho_4 - \frac{M_1^* - \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} M_2^*}{2M_5^*} \rho_5 \tag{B.4}$$

Enfin, l'équation d'état peut s'écrire :

$$P = \sum_{I=1}^5 R_I \rho_I T \quad (\text{B.5})$$

Ce qui donne en introduisant la relation (C.4) :

$$\frac{P}{T} = \left(R_2 + \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} R_1 \right) \rho_2 + (R_3 - R_4) \rho_3 + \left(R_4 + \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} R_1 \right) \rho_4 + \left(R_5 - \frac{M_1^* - \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} M_2^*}{2M_5^*} R_1 \right) \rho_5 \quad (\text{B.6})$$

De même, en introduisant (C.4) dans (C.3) , on obtient le système suivant :

$$\begin{cases} (R_2 + AR_1)\rho_2 + (R_3 - R_1)\rho_3 + (R_4 + AR_1)\rho_4 + (R_5 - BR_1)\rho_5 - P/T = 0 \\ \rho_4^2 - K_{1eq}\rho_2 = 0 \\ -AK_{2eq}\rho_2 + \rho_3^2 - AK_{2eq}\rho_3 + AK_{2eq}\rho_4 + BK_{2eq}\rho_5 = 0 \\ \rho_3\rho_4 - K_{3eq}\rho_5 = 0 \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

$$\text{avec} \quad A = \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} \quad \text{et} \quad B = \frac{M_1^* - \frac{\rho_{1\infty}}{\rho_{2\infty}} M_2^*}{2M_5^*}$$

Ce système d'équation non linéaire est résolu suivant une méthode de Newton - Raphson. En introduisant le vecteur X de coordonnées $(\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4)^t$, le système s'écrit alors :

$$F(X)=0 \quad (\text{B.8})$$

Et la procédure de résolution est la suivante, jusqu'à convergence :

$$X^{m+1} = X^m - DF^{-1}(X^m)F(X^m) \quad (\text{B.9})$$

Où la matrice DF^l est donnée ci-dessous :

$$\begin{pmatrix} R_2 + AR_1 & R_3 - R_1 & R_4 + AR_1 & R_5 - BR_1 \\ -K_{1eq} & 0 & 2\rho_4 & 0 \\ -AK_{2eq} & 2\rho_3 + K_{2eq} & -AK_{2eq} & BK_{2eq} \\ 0 & \rho_4 & \rho_3 & -K_{3eq} \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

Annexe C

Traitement des équations

C.1 Equations sans dimension

C.1.1. Equation d'état

Pour une équation en exponentielle

L'équation d'état conserve la même forme :

$$\rho e = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I \quad (C.1)$$

$$= \sum_{\text{atomes}} 3/2 R_I \rho_I T + \sum_{\text{molécules}} \rho_I \left(5/2 R_I T + \frac{R_I \theta_{VI}}{\exp(\theta_{VI}/T) - 1} \right) + \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I^0$$

En prenant pour $I=I$, ns :

$$\theta_{VI} = \theta_{VI}^* / T_{ref}^*, \quad e_I^0 = e_I^{0*} / (u_{\infty}^*)^2, \quad R_I = R_I^* / (u_{\infty}^{*2} / T_{ref}^*) \quad (C.2)$$

Pour une équation polynomiale

Les coefficients des polynômes doivent être rendus sans dimension par la formule suivante :

$$a_{k,I} = a_{k,I}^* / (T_{ref}^*)^{k-1}, \quad k = 1,5 \quad (C.3)$$

$$a_{6,I} = a_{6,I}^* / T_{ref}^*$$

Pour la pression

On conserve la relation suivante :

$$P = \left(\sum_{l=1}^{ns} \rho_l R_l \right) T. \quad (C.4)$$

C.1.2. Termes de diffusion

Le flux de diffusion massique et le flux de chaleur conservant la même forme mais les coefficients de transport doivent faire l'objet d'une étude assez soignée. En ce qui concerne la viscosité, la loi de Sutherland devient :

$$\mu = \mu_0^* \sqrt{\frac{T}{T_0^*}} \frac{1 + S^*/T_0^*}{1 + S^*/T} \quad (C.5)$$

avec $\mu_0^s = \mu_0^*/\mu_{ref}^*$, $T_0^s = T_0^*/T_{ref}^*$, et $S^s = S^*/T_{ref}^*$

La relation de Blottner s'écrit maintenant :

$$\mu_l = D^\mu \exp\left[\left(A_l^\mu \log T + B_l^\mu \right) \log T + C_l^{\mu*} \right] \quad (C.6)$$

avec

$$A_l^\mu = A_l^{\mu*}$$

$$B_l^\mu = 2A_l^{\mu*} \log T_{ref}^* + B_l^{\mu*}$$

$$C_l^\mu = A_l^{\mu*} \left(\log T_{ref}^* \right)^2 + B_l^{\mu*} \log T_{ref}^* + C_l^{\mu*}$$

$$D^\mu = 0.1/\mu_{ref}^*$$

Ce qui conduit à l'écriture suivante de la formule de Wilke pour le mélange :

$$\mu = \sum_{l=1}^{ns} \mu_l \frac{C_l}{M_l} \frac{1}{\sum_{K=1}^{ns} \frac{C_K}{M_K} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_K}} \left(\frac{M_K^*}{M_l^*} \right)^{1/4} \right)^2} \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_l^*}{M_K^*} \right)}$$

La conductivité des espèces retient la même forme qu'auparavant :

$$\lambda_l = \mu_l \left(C_{V_l} + \frac{9}{4} R_l \right),$$

Où C_{V_i} conserve une écriture identique. On obtient pour le mélange, avec la formule de Wilke :

$$\lambda = \sum_{l=1}^{ns} \lambda_l \frac{C_l}{M_l^*} \frac{1}{\sum_{K=1}^{ns} \frac{C_K}{M_K} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_K}} \left(\frac{M_K^*}{M_l^*} \right)^{1/4} \right)^2} / \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_l^*}{M_K^*} \right)}$$

C.1.3. Termes sources

Les termes de production peuvent s'écrire :

$$\omega_l = \sum_r (\nu_{l_r}' - \nu_{l_r}'') \overline{\alpha_{l_r}} \left[-R_r' \prod_j \rho_j^{\nu_{j_r}'} + R_r'' \overline{\alpha_r'} \prod_j \rho_j^{\nu_{j_r}''} \right]$$

Avec :

$$\overline{\alpha_{l_r}} = \overline{A_{clr}} T^{B_{cr}} \exp(-\theta_{cr}/T)$$

$$\overline{\alpha_r'} = \frac{1}{\exp(Ach_{1r} + Ach_{2r}/T + Ach_{3r}/T^2 + Ach_{4r}/T^3 + Ach_{4r}/T^4)}$$

$$Ach_{kr} = A_{kr}^* (10000/T_{ref}^*)^{k-1}$$

$$\overline{A_{clr}} = (L_{ref}^* / \rho_\infty^* u_\infty^*) M_l^* A_{cr}^* T_{red}^{* B_{cr}}$$

$$\theta_{cr} = \theta_{cr}^* / T_{ref}^*$$

$$R_r' = \left(\rho_\infty^* \sum_j \nu_{j_r}' \right) / \left(\prod_j M_j^* \nu_{j_r}' \right)$$

$$R_r'' = 10^{-6} (\sum_j \nu_{j_r}'' - \sum_j \nu_{j_r}') \left(\rho_\infty^* \sum_j \nu_{j_r}'' \right) / \left(\prod_j M_j^* \nu_{j_r}'' \right)$$

C.2. Coordonnées curvilignes

La transformation des équations en coordonnées curvilignes, conduit aux relations suivantes pour F_V , G_V et \hat{H}_V

$$F_v = \mu \left(\begin{array}{c} \frac{Le}{Pr} \left(\xi_x \frac{\partial C_1}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial C_1}{\partial \eta} \right) \\ \frac{Le}{Pr} \left(\xi_x \frac{\partial C_2}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial C_2}{\partial \eta} \right) \\ \vdots \\ \frac{Le}{Pr} \left(\xi_x \frac{\partial C_{ns}}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial C_{ns}}{\partial \eta} \right) \\ \frac{4}{3} \left(\xi_x \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} \left(\xi_y \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) - \frac{2a}{3} \frac{v}{y} \\ \left(\xi_y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial u}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \\ \frac{1}{Pr} \left[(1 - Le) C_{pf}^* \left(\xi_x \frac{\partial T}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + Le \left(\xi_x \frac{\partial h}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial h}{\partial \eta} \right) \right] \\ + u \left(\frac{4}{3} \left(\xi_x \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} \left(\xi_y \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) - \frac{2a}{3} \frac{v}{y} \right) \\ + v \left(\xi_y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial u}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \end{array} \right)$$

$$G_v = \mu \left(\begin{array}{c} \frac{Le}{Pr} \left(\xi_y \frac{\partial C_1}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial C_1}{\partial \eta} \right) \\ \frac{Le}{Pr} \left(\xi_y \frac{\partial C_2}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial C_2}{\partial \eta} \right) \\ \vdots \\ \frac{Le}{Pr} \left(\xi_y \frac{\partial C_{ns}}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial C_{ns}}{\partial \eta} \right) \\ \left(\xi_y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial u}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \\ \frac{4}{3} \left(\xi_y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} \left(\xi_x \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) - \frac{2a}{3} \frac{v}{y} \\ \frac{1}{Pr} \left[(1 - Le) C_{pf}^* \left(\xi_y \frac{\partial T}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + Le \left(\xi_y \frac{\partial h}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial h}{\partial \eta} \right) \right] \\ + v \left(\frac{4}{3} \left(\xi_y \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} \left(\xi_x \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} a \frac{v}{y} \right) \\ + u \left(\xi_y \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial u}{\partial \eta} + \xi_x \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \end{array} \right)$$

Et enfin

$$H_v = \mu \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \left(\xi_x \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} \left(\xi_y \frac{\partial v}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) - \frac{2}{3} a \frac{v}{y} \\ 0 \end{array} \right)$$

C.3. Hypothèse de couche mince

On définit ici les vecteurs S_{V1} et S_{V3} introduits par l'hypothèse de couche mince. Et par l'introduction des notations suivantes pour l'équivalence métrique :

$$W_V = \frac{4}{3}\eta_x^2 + \eta_y^2; \quad X_V = \frac{4}{3}\eta_y^2 + \eta_x^2; \quad Y_V = \frac{1}{3}\eta_x\eta_y; \quad Z_V = \eta_x^2 + \eta_y^2.$$

On obtient alors pour S_{V1} :

$$S_{V1} = \frac{\mu}{J} \left(\begin{array}{c} \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_1}{\partial \eta} \\ \\ \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_2}{\partial \eta} \\ \\ \vdots \\ \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_{ns}}{\partial \eta} \\ W_V \frac{\partial u}{\partial \eta} + Y_V \frac{\partial v}{\partial \eta} - a \frac{2}{3} \eta_x \frac{v}{y} \\ Y_V \frac{\partial u}{\partial \eta} + X_V \frac{\partial v}{\partial \eta} - a \frac{2}{3} \eta_y \frac{v}{y} \\ \frac{1}{2} W_V \frac{\partial u^2}{\partial \eta} + \frac{1}{2} X_V \frac{\partial v^2}{\partial \eta} + Y_V \frac{\partial uv}{\partial \eta} - \frac{2}{3} a (\eta_x u + \eta_y v) \frac{v}{y} \\ + \frac{Z_V}{Pr} \left[(1 - Le) C_{pf} \frac{\partial T}{\partial \eta} + Le \frac{\partial h}{\partial \eta} \right] \end{array} \right)$$

La seule composante non de S_{V3} s'écrit :

$$S_{V_{3ns+2}} = \mu \left(\frac{2}{3} \eta_x \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{2}{3} \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{4}{3} \frac{v}{y} \right)$$

Dans certaines recherches [74] il a été constaté qu'en écoulement axisymétrique le terme de diffusion S_{V3} conduit à une incohérence sur l'équation de quantité de mouvement suivant la direction radiale y au voisinage de l'axe de symétrie. Cette dernière est liée aux contributions $\partial u / \partial \eta$ et v/y qui, dans les équations complètes, sont annulées par d'autres contributions négligées dans l'approximation de couche mince. De ce fait et afin de lever cette incohérence les termes impliqués seront supprimés du terme S_{V3} qui s'écrira maintenant sous la forme :

$$S_{V_{3ns+2}} = \mu \left(\frac{2}{3} \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right)$$

Annexe D

Le problème de Riemann pour une équation scalaire

Considérons le problème de Riemann suivant :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f(v)}{\partial x} = 0, \quad t \in]0; \Delta t[\quad (\text{D.1})$$

Avec la condition initiale :

$$v(x,0) = \begin{cases} v_g & x < 0 \\ v_d & x > 0. \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

Et supposons de plus que la fonction f est convexe ($f'' > 0$).

D.1. Remarques préliminaires

Si $v(x,t)$ est une solution de (E.1) et (E.2) alors $v(\lambda x, \lambda t)$ est aussi solution quelque soit λ . Cherchons donc la solution sous la forme d'une fonction ne dépendant que de $\zeta = x/t$

Introduisons tout d'abord trois types d'ondes élémentaires $v(\zeta)$ qui nous permettrons de définir les solutions de (E.1) et (E.2) pour $t > 0$:

- L'état constant : $v(\zeta) = \text{Cste}$ (solution unique)
- L'onde de choc, de forme :

$$v(x,0) = \begin{cases} v_0 & x < st \\ v_1 & x > st. \end{cases} \quad (\text{D.3})$$

où s est la vitesse de déplacement de l'onde de choc, qui vérifie la relation de Rankine-Hugoniot (9.7) : $s(v_0 - v_1) = f(v_0) - f(v_1)$. De plus, la condition d'entropie (9.11) : $f'(v_1) < s < f'(v_0)$ doit être satisfaite.

- L'onde de détente qui est une solution continue $v(\zeta)$ de (D.1) . On obtient alors :

$$[f'[v(\zeta)] - \zeta] - v'(\zeta) = 0 \quad (D.4)$$

Si $v'(\zeta) \neq 0$ cette relation est réduite à $f'[v(\zeta)] = \zeta$ qui définit $v(\zeta)$ de manière unique car $f'' > 0$. La solution s'écrit alors :

$$v(x,t) = \begin{cases} v_0 & x/t \leq f'(v_0) \\ v(x,t) & f'(v_0) \leq x/t \leq f'(v_1) \\ v_1 & x/t \geq f'(v_1) \end{cases} \quad (D.5)$$

On peut remarquer donc que la fonction f est affine dans l'intervalle limité par v_0 et v_1 , alors $s = f'(v_0) = f'(v_1)$ est la condition d'entropie est systématiquement satisfaite . On peut parler dans ce cas du phénomène de discontinuité de contact.

D.2. Solution du problème de Riemann

Les deux seuls cas à prendre en considération sont $v_d > v_g$ et $v_d < v_g$ (le cas $v_d = v_g$ a pour unique solution $v(x,t) = v_d = v_g$).

- **Cas** $v_d > v_g$

Comme $f'' > 0$, on a $f'(v_d) > f'(v_g)$; la discontinuité initiale n'est donc pas admissible et ne peut pas se propager (la condition entropique n'est pas vérifiée). La solution est alors une onde de détente, représentée par la figure E.1 :

$$v(x,t) = \begin{cases} v_g & x/t \leq f'(v_g) \\ (f')^{-1}(x,t) & f'(v_g) \leq x/t \leq f'(v_d) \\ v_1 & x/t \geq f'(v_d) \end{cases} \quad (D.6)$$

- **Cas** $v_d < v_g$

La discontinuité initiale est donc admissible et peut se propager à la vitesse s donnée par la condition de Rankine – Hugoniot :

$$s(v_g - v_d) = f(v_g) - f(v_d) \quad (D.7)$$

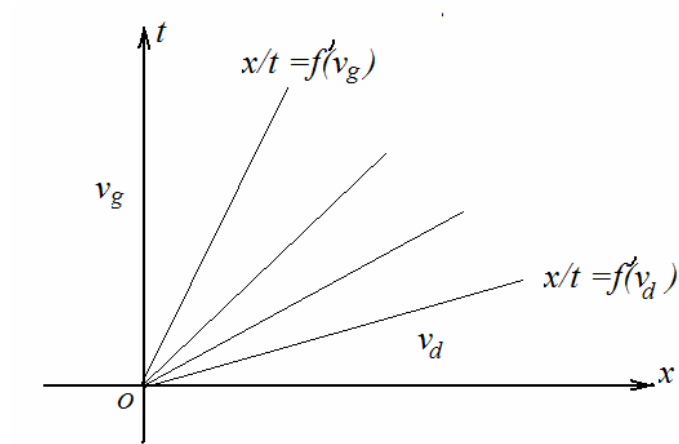


Figure D.1 : Ondes de détente

La solution entropique de (D.1) et (D.2) est une onde de choc, représentée sur la figure D.2 avec :

$$v(x,0) = \begin{cases} v_g & x < st \\ v_d & x > st. \end{cases} \quad (\text{D.8})$$

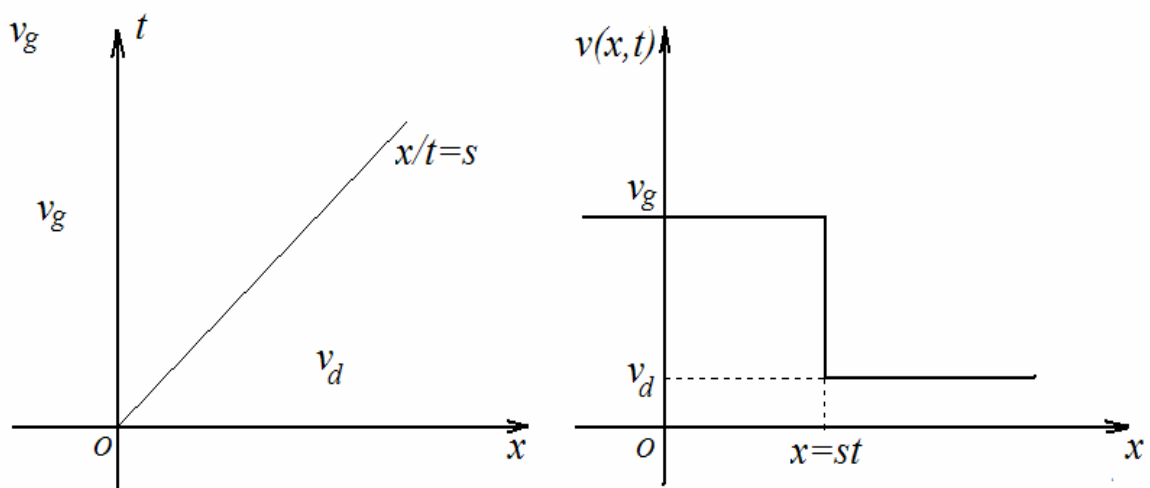


Figure D.2 : Onde de Choc

D.3. Forme générale de la solution

La solution d'un problème de Riemann peut s'écrire de façon générale sous la forme :

$$v(x,t) = w_R(\zeta, v_g, v_d) \quad \text{avec} \quad \zeta = x/t \quad (\text{D.9})$$

et

$$w_R(\zeta, v_g, v_d) = \begin{cases} u & \text{si } u = v \\ s = \frac{f(u) - f(v)}{u - v} & \text{si } u > v \\ v & \zeta > s \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

$$w_R(\zeta, u, v) = \begin{cases} u & \zeta > s \\ (f')^{-1}(\zeta) & f'(u) \leq x/t \leq f'(v) \\ v & \zeta > f'(v) \end{cases}$$

Pour une description plus détaillée, on se rapportera utilement aux références [51] et [124].

Annexe E

Dérivées de la température et de la pression

Nous donnons en premier lieu, la loi de la représentation thermodynamique sous une forme compacte :

$$\rho e = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I e_I = \sum_{I=1}^{ns} \rho_I \int C_{V I}(T) dT. \quad (\text{E.1})$$

On obtient alors pour la différentielle de la température :

$$dT = \frac{d(\rho e)}{\sum_{I=1}^{ns} \rho_I C_{V I}} - \sum_{K=1}^{ns} \left(\frac{e_K}{\sum_{I=1}^{ns} \rho_I C_{V I}} \right) d\rho_K. \quad (\text{E.2})$$

En ce qui concerne la pression, la relation :

$$P = \left(\sum_{I=1}^{ns} \rho_I R_I \right) T. \quad (\text{E.3})$$

Donne

$$dP = \left(\sum_{I=1}^{ns} \rho_I R_I \right) dT + \sum_{I=1}^{ns} R_I T d\rho_I \quad (\text{E.4})$$

D'un autre coté, et par définition nous savons que :

$$dP = \sum_{I=1}^{ns} \chi_I d\rho_I + \kappa d(\rho e) \quad (\text{E.5})$$

Et par le procédé d'identification entre les deux expressions, on obtient :

$$\chi_I = \left[\sum_{J=1}^{ns} (\rho_J R_J) \right] \frac{\partial T}{\partial \rho_J} + R_I T \quad (\text{E.6})$$

$$\kappa = \left[\sum_{J=1}^{ns} (\rho_J R_J) \right] \frac{\partial T}{\partial \rho e}$$

Annexe F

Matrices pour les équations d'Euler

F.1. Matrices jacobiennes et Vecteurs propres

Nous détaillons ici les matrices jacobiennes par rapport aux variables conservatives U des flux convectifs F et G ainsi que les vecteurs propres à droite. Nous rappelons tout d'abord U , F et G :

$$U = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} \\ \rho \hat{u} \\ \rho \hat{v} \\ E \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ u(E + P) \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho_1 v \\ \rho_2 v \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{ns} v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + P \\ v(E + P) \end{pmatrix} \quad (\text{F.1})$$

Les matrices Jacobiennes s'écrivent alors :

$$A_x = \begin{pmatrix} (1-C_1)u & -C_1 & \cdot & \cdot & \cdot & -C_1u & C_1 & 0 & 0 \\ -C_2u & (1-C_2)u & \cdot & \cdot & \cdot & -C_2u & C_2 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -C_{ns}u & -C_{ns}u & \cdot & \cdot & \cdot & (1-C_{ns})u & C_{ns} & 0 & 0 \\ (-u^2 + \alpha_1) & (-u^2 + \alpha_2) & \cdot & \cdot & \cdot & (-u^2 + \alpha_{ns}) & (2-\kappa)u & -\kappa v & 0 \\ -uv & -uv & \cdot & \cdot & \cdot & -uv & v & u & 0 \\ u(\alpha_1 - H) & u(\alpha_2 - H) & \cdot & \cdot & \cdot & u(\alpha_{ns} - H) & (H - \kappa u^2) & -\kappa uv & u(1 + \kappa) \end{pmatrix}$$

et

$$A_y = \begin{pmatrix} (1-C_1)v & -C_1v & \cdot & \cdot & \cdot & -C_1v & 0 & C_1 & 0 \\ -C_2v & (1-C_2)v & \cdot & \cdot & \cdot & -C_2v & 0 & C_2 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -C_{ns}v & -C_{ns}v & \cdot & \cdot & \cdot & (1-C_{ns})v & 0 & C_{ns} & 0 \\ -uv & -uv & \cdot & \cdot & \cdot & -uv & v & u & 0 \\ (-v^2 + \alpha_1) & (-v^2 + \alpha_2) & \cdot & \cdot & \cdot & (-v^2 + \alpha_{ns}) & -\kappa u & (2-\kappa)u & \kappa \\ v(\alpha_1 - H) & v(\alpha_2 - H) & \cdot & \cdot & \cdot & v(\alpha_{ns} - H) & -\kappa uv & (H - \kappa v^2) & v(1 + \kappa) \end{pmatrix}$$

où $H = h + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$ est l'enthalpie totale, et où les paramètres α_i représentent la quantité $\chi_i + \frac{1}{2}\kappa(u^2 + v^2)$.

nous pouvons rappeler que la matrice A_x (resp. A_y) a $ns+3$ valeurs propres rangées de la manière suivante : les ns premières sont égales à u , et les trois dernières sont $u + a_f$, u , $u - a_f$, où a_f est la célérité du son figée :

$$a_f^l = \sum_{l=1}^{ns} C_l \chi_l + \kappa h.$$

La matrice R_x des vecteurs propres à droite et son inverse R_x^{-1} sont égales à :

$$\frac{1}{a_f^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & C_1 & 0 & C_1 \\ 0 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & C_2 & 0 & C_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & C_{ns} & 0 & C_{ns} \\ u & u & \cdot & \cdot & \cdot & u & u + a_f & 0 & u - a_f \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & v & 1 & v \\ \frac{-\chi_1}{\kappa} + u^2 & \frac{-\chi_2}{\kappa} + u^2 & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{-\chi_{ns}}{\kappa} + u^2 & H + ua_f & v & H - ua_f \end{pmatrix} R_x$$

$$\begin{pmatrix} a_f^2 - C_1\alpha_1 & -C_1\alpha_2 & \cdot & \cdot & \cdot & -C_1\alpha_{ns} & C_1\kappa u & C_1\kappa v & C_1\kappa \\ -C_2\alpha_1 & a_f^2 - C_2\alpha_2 & \cdot & \cdot & \cdot & -C_2\alpha_{ns} & C_2\kappa u & C_2\kappa v & C_2\kappa \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \frac{-C_{ns}\alpha_1}{(-ua_f + \alpha_1)} & \frac{-C_{ns}\alpha_2}{(-ua_f + \alpha_2)} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{a_f^2 - C_{ns}\alpha_{ns}}{(-ua_f + \alpha_{ns})} & \frac{C_{ns}\kappa u}{(a_f - \kappa u)} & \frac{C_{ns}\kappa v}{-\kappa v} & \frac{C_{ns}\kappa}{\kappa} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \\ \frac{-v\alpha_1}{(ua_f + \alpha_1)} & \frac{-v\alpha_2}{(ua_f + \alpha_2)} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{-v\alpha_{ns}}{(-ua_f + \alpha_{ns})} & \frac{\kappa uv}{(-a_f - \kappa u)} & \frac{a_f^2 + \kappa v^2}{-\kappa v} & \frac{-\kappa v}{\kappa} \\ \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} & \frac{2}{2} \end{pmatrix} R_x^{-1}$$

Les matrices R_y et R_y^{-1} ont une expression similaire

Ce choix de vecteurs propres permet d'obtenir des variables caractéristiques $W = R^{-1}U$ qui ont la dimension d'une pression. On applique ainsi les limiteurs sur une grandeur proportionnelle à une variable ayant une variation importante à travers une onde de choc.

F.2. Moyenne de Roe

On peut rappeler que pour un mélange de gaz, il y'a une équation de plus à satisfaire pour déterminer la moyenne de Roe :

$$\sum_{I=1}^{ns} \overline{\chi_I} \Delta \rho_I + \overline{\kappa} \Delta(\rho e) = \Delta P. \quad (\text{F.2})$$

où le terme avec le symbole $\overline{(\cdot)}$ équivaut à $(\cdot)_{i+\frac{1}{2},j}$ ou $(\cdot)_{i,j+\frac{1}{2}}$, l'opérateur Δ représente la différence $(\cdot)_{R(\text{droit})} - (\cdot)_{L(\text{gauche})}$ et où les états gauche et droit peuvent être soit i, j et $i+1, j$ soit i, j et $i, j+1$. Nous suivons dans ce contexte l'approche proposée par Montagné et Vinokur [91]. On définit une interpolation linéaire entre les états gauche (L) et les états droit (R).

$$\begin{cases} \rho_I = (\rho_I)_G + \tau \rho_I \\ \rho e = (\rho e)_G + \tau (\rho e) \end{cases} \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (\text{F.3})$$

Les intégrales ci-dessous satisfont l'équation F.3 exactement :

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_I &= \int_0^1 \chi_I[\rho_I(\tau), \rho e(\tau)] d\tau \\ \hat{\kappa} &= \int_0^1 \kappa[\rho_I(\tau), \rho e(\tau)] d\tau \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

Numériquement, ces deux termes intégrales ne sont données que par les valeurs à droite et à gauche puisqu'on approxime l'intégration, et qu'on est donc amené à utiliser des valeurs approchées qui ne vérifient pas exactement (F.2). On introduit alors χ_{I_m} et κ_m qui représentent l'approximation numérique de $\hat{\chi}_I$ et $\hat{\kappa}$ que l'on projette sur le plan défini par (F.2) pour obtenir les $\overline{\chi_I}$ et $\overline{\kappa}$ les plus proches de χ_{I_m} et κ_m . Enfin, pour la moyenne de Roe ne dépende pas d'une constante arbitraire dans la définition de l'énergie, on utilise dans ce cas une nouvelle formulation du problème dans le plan cité précédemment à savoir $(1/\kappa, \chi/\kappa)$ en divisant (F.2) par $\overline{\kappa}$:

$$-\sum_{I=1}^{ns} \frac{\overline{\chi_I}}{\overline{\kappa}} \Delta \rho_I + \frac{1}{\overline{\kappa}} \Delta P = \Delta(\rho e). \quad (\text{F.5})$$

L'orientation du plan défini par (F.5) dans l'espace des variables $\overline{\chi}_I$ et $\overline{\kappa}$ est maintenant entièrement déterminée par les états d gauche et de droite. La projection selon la normale de composante $(-\Delta\rho_1, -\Delta\rho_2, \dots, -\Delta\rho_{ns}, \Delta P)^T$ conduit à ns relations de la forme :

$$\Delta\rho_I \frac{1}{\kappa} + \Delta P \frac{\overline{\chi}_I}{\kappa} = \Delta\rho_I \frac{1}{\kappa_m} + \Delta P \frac{\chi_{I_m}}{\kappa_m} \quad (\text{F.6})$$

La résolution du système formé de (G.5) et de ces ns équations mène à :

$$\begin{aligned} \overline{\chi}_I &= \frac{b\chi_{I_m} + \Delta\rho_I \delta P}{b - \Delta P \delta P} \\ \overline{\kappa} &= \frac{b\kappa_m}{b - \Delta P \delta P} \end{aligned} \quad (\text{F.7})$$

avec

$$\begin{aligned} b &= \Delta P^2 + \sum_{I=1}^{ns} \Delta\rho_I^2 \\ \delta P + \Delta p - \kappa_m \Delta(\rho e) - \sum_{I=1}^{ns} \chi_{I_m} \Delta\rho_I \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

et où les approximations χ_{I_m} et κ_m sont données par la formule trapézoïdale :

$$(\cdot)_m = \frac{(\cdot)_G + (\cdot)_L}{2} \quad (\text{F.9})$$

On introduit enfin un facteur d'échelle s pour rendre les χ_I adimensionnelles. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \overline{\chi}_I &= \frac{b\chi_{I_m} + s^2 \Delta\rho_I \delta P}{b - \Delta P \delta P} \\ \overline{\kappa} &= \frac{b\kappa_m}{b - \Delta P \delta P} \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

avec

$$\begin{aligned} b &= \Delta P^2 + \sum_{I=1}^{ns} (s\Delta\rho_I)^2 \\ \delta P + \Delta p - \kappa_m \Delta(\rho e) - \sum_{I=1}^{ns} \chi_{I_m} \Delta\rho_I \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

avec comme facteur d'échelle :

$$s = (a_f^2)_m \quad (\text{F.12})$$

F.3. Discrétisation implicite en coordonnées Curvilignes

Nous donnons dans ce qui suit l'écriture des matrices intervenant dans la linéarisation des équation d'Euler en coordonnées curvilignes .

$$\begin{aligned}
A^W &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} A_{x_{i-1,j}}^n + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} A_{y_{i-1,j}}^n + \Omega_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^n \right] \\
A^S &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} A_{x_{i,j-1}}^n + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} A_{y_{i,j-1}}^n + \Omega_{\eta_{i,j-\frac{1}{2}}}^n \right] \\
A^P &= \frac{I}{J_{i,j}} + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] A_{x_{i,j}}^n + \left[\left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] A_{y_{i,j}}^n + \Omega_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^n + \Omega_{\xi_{i-\frac{1}{2},j}}^n \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left\{ \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] A_{x_{i,j}}^n + \left[\left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] A_{y_{i,j}}^n + \Omega_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}}^n + \Omega_{\eta_{i,j-\frac{1}{2}}}^n \right\} \\
A^N &= \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} A_{x_{i,j+1}}^n + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} A_{y_{i,j+1}}^n + \Omega_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}}^n \right] \\
A^E &= \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} A_{x_{i+1,j}}^n + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} A_{y_{i+1,j}}^n + \Omega_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^n \right]
\end{aligned} \tag{F.13}$$

Les opérateurs implicites du premier ordre $\Omega_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}$ et $\Omega_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\Omega_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} &= \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}} \text{diag} \left[\psi \left(a_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^l \right) \right] R_{\xi_{i+\frac{1}{2},j}}^{-1} \\
\Omega_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{J_{i,j+\frac{1}{2}}} R_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}} \text{diag} \left[\psi \left(a_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}}^l \right) \right] R_{\eta_{i,j+\frac{1}{2}}}^{-1}
\end{aligned}$$

F.4. Équations d'Euler pour un mélange réactif

En l'absence de termes de diffusion, par conservation de la masse des éléments atomiques, sur chaque volume de contrôle et à chaque instant, les proportions initiales d'éléments atomiques se conservent. Ceci se traduit simplement par l'annulation d'une certaine combinaison linéaire des fractions massiques. La vérification de la propriété, pour une discrétisation précise à l'ordre un, est explicitée ci-dessous avec une discussion concernant le passage à l'ordre deux.

Conservation des proportions locales d'atomes

La discrétisation des équations d'Euler pour un mélange réactif ou non doit donc conserver les proportions locales d'atomes, c'est-à-dire, assurer à chaque instant et en tout point du maillage que les masses volumiques partielles des espèces vérifient des identités du type :

$$\sum_{I=1}^{ns} \beta_I \rho_I^n = 0 \quad (\text{F.14})$$

Le nombre N_c de telles identités est égal au nombre d'atomes élémentaires dans le mélange (à titre d'exemple, pour un mélange d'air à cinq espèces on a deux identités du type (F.14)). Il est clair que cela pourrait être automatiquement réalisé en remplaçant N_c équations de bilan des espèces par les N_c relations du type (F.14). Se poserait alors de nouveau le problème, déjà évoqué, du choix des équations de bilan à écarter. Par ailleurs, nous soulignons que lorsque les phénomènes de diffusion sont introduits, la propriété de conservation locale des proportions d'atomes élémentaires n'est généralement plus vérifiée. Il est donc légitime de rechercher une discrétisation des flux convectifs qui respecte au mieux cette propriété.

Pour le schéma de Roe du premier ordre, avec à une discrétisation explicite en temps, la vérification est simple. Supposons que (F.14) soit vérifiée à l'instant n et montrons que cette identité est conservée à l'instant $n+1$. Remarquons tout d'abord que (F.14) implique aussi :

$$\begin{aligned} \sum_{I=1}^{ns} \beta_I C_I^n &= 0 && \text{en chaque point du maillage} \\ \sum_{I=1}^{ns} \beta_I \bar{C}_I^n &= 0 && \text{en chaque interface} \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

où la notation $\bar{(\cdot)}$ représente la moyenne de Roe. En formant la combinaison linéaire des ns équations de bilan des espèces discrètes (12.4), avec les mêmes coefficients β_I ,

on observe que les termes centrés des flux numériques se simplifient de façon immédiate et que l'étude doit porter sur le terme $R_{i+\frac{1}{2},j}^{-1} \text{diag}(\psi) R_{i+\frac{1}{2}}^{-1} (U_{i+1} - U_i)$.

En fait un calcul rapide de la $I^{\text{ème}}$ composante de ce vecteur donne:

$$\begin{aligned}
 I^{\text{ème}} \text{ composante} &= \bar{a}_f^{-2} \psi(\bar{u}) \Delta \rho_I \\
 &+ \left[- \left(\sum_{J=1}^{ns} \alpha_J \Delta \rho_J \right) + \bar{\kappa} \bar{u} \Delta \rho u - \bar{\kappa} \Delta E \right] \psi(\bar{u}) \bar{C}_I \\
 &+ \left[g(\bar{u}) \psi(\bar{u} + \bar{a}_f) \Delta \rho u \right] \bar{C}_I + \left[h(\bar{u}) \psi(\bar{u} - \bar{a}_f) \Delta \rho u \right] \bar{C}_I
 \end{aligned} \tag{F.16}$$

où toutes les variables sont prises à l'instant n et où g et h sont des fonctions de \bar{u} . La $I^{\text{ème}}$ composante de ce vecteur est donc linéaire en ρ_I et \bar{C}_I . On obtient ainsi :

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{I=1}^{ns} \beta_I (\rho_I^{n+1} - \rho_I^n) = 0. \tag{F.17}$$

d'où la conclusion. Une étude similaire de la discrétisation implicite de ce schéma conduit aux mêmes conclusions.

Le passage à l'ordre deux par l'intermédiaire des limiteurs implique la présence, dans chaque composante du vecteur $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$, de contributions des interfaces $i - \frac{1}{2}, i + \frac{1}{2}, i + \frac{3}{2}$ au lieu de la seule interface $i + \frac{1}{2}$ et la combinaison linéaire obtenue n'est plus automatiquement nulle. Nous nous sommes satisfait dans ce travail des résultats obtenus avec une conservation des proportions atomiques élémentaires vérifiées à l'ordre un seulement tout en sachant que le problème se poserait de manière plus accrue en cas de prise en considération du déséquilibre thermique. On résout alors des équations de conservation de l'énergie pour chaque molécule et constitution du mélange doit être correctement déterminée. Pour remédier à cela Abgrall [2] utilise des limiteurs seulement sur trois fractions massiques (dans le cas de l'air constitué de cinq espèces habituellement).

Annexe G

Matrices pour les équations de Navier – Stokes

G.1. Vecteurs et matrices jacobiennes pour les termes visqueux

Afin de faciliter la lecture de cette annexe, nous rappelons tout d'abord l'écriture des vecteurs S_{V1} et S_{V3} . Introduisons les notations suivantes pour la compatibilité métrique :

$$W_V = \frac{4}{3}\eta_x^2 + \eta_y^2; \quad X_V = \frac{4}{3}\eta_y^2 + \eta_x^2; \quad Y_V = \frac{1}{3}\eta_x\eta_y; \quad Z_V = \eta_x^2 + \eta_y^2.$$

On obtient pour S_{V1} :

$$S_{V1} = \frac{\mu}{J} \left(\begin{array}{c} \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_1}{\partial \eta} \\ \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_2}{\partial \eta} \\ \vdots \\ \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{\partial C_{ns}}{\partial \eta} \\ W_V \frac{\partial u}{\partial \eta} + Y_V \frac{\partial v}{\partial \eta} - a \frac{2}{3} \eta_x \frac{v}{y} \\ Y_V \frac{\partial u}{\partial \eta} + X_V \frac{\partial v}{\partial \eta} - a \frac{2}{3} \eta_y \frac{v}{y} \\ \frac{1}{2} W_V \frac{\partial u^2}{\partial \eta} + \frac{1}{2} X_V \frac{\partial v^2}{\partial \eta} + Y_V \frac{\partial uv}{\partial \eta} - \frac{2}{3} a (\eta_x u + \eta_y v)_x \frac{v}{y} \\ + \frac{Z_V}{Pr} \left[(1 - Le) C_{pf} \frac{\partial T}{\partial \eta} + Le \frac{\partial h}{\partial \eta} \right] \end{array} \right)$$

La seule composante non nulle de S_{V_3} s'écrit :

$$S_{V_3}_{ns+2} = \mu \left(\frac{2}{3} \eta_y \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \quad (G.1)$$

On définit ensuite DV_1 :

$$DV_1 = \frac{1}{J} \begin{pmatrix} \frac{Le}{Pr} Z_v C_1 \\ \frac{Le}{Pr} Z_v C_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{Le}{Pr} Z_v C_{ns} \\ W_v u + Y_v v \\ Y_v u + X_v v \\ \frac{1}{2} W_v u^2 + \frac{1}{2} X_v v^2 + Y_v uv + \frac{Z_v}{Pr} [(1 - Le) C_{pf} T + Leh] \end{pmatrix}$$

Puis DV_2 et DV_3 :

$$DV_2 = -\frac{2}{3} \frac{1}{yJ} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ \eta_x v \\ \eta_y v \\ (\eta_x u + \eta_y v) v \end{pmatrix} \quad DV_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \eta_y v \\ 0 \end{pmatrix}$$

Les composantes non nulles des matrices jacobienes : $H_1 = \partial DV_1 / \partial U$,
 $H_2 = \partial DV_2 / \partial U$ et $H_3 = \partial DV_3 / \partial U$ sont les suivantes :

$$H_{1I,K} = -\frac{1}{J} \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{C_I}{\rho} \quad I = 1, ns \quad K = 1, ns \quad K \neq I$$

$$H_{ii,I} = \frac{1}{J} \frac{Le}{Pr} Z_V \frac{1-C_I}{\rho} \quad I = 1, ns$$

$$H_{1ns+1,I} = -\frac{1}{J\rho} (W_V u + Y_V v) \quad I = 1, ns$$

$$H_{1ns+1,ns+1} = \frac{1}{J\rho} W_V$$

$$H_{1ns+1,ns+2} = \frac{1}{J\rho} Y_V$$

$$H_{1ns+2,I} = -\frac{1}{J\rho} (Y_V u + X_V v) \quad I = 1, ns$$

$$H_{1ns+2,ns+1} = \frac{1}{J\rho} Y_V$$

$$H_{1ns+2,ns+2} = \frac{1}{J\rho} X_V$$

$$\begin{aligned}
H_{1ns+3,I} &= -\frac{1}{J\rho} \left\{ W_v u^2 + X_v v^2 + 2Y_v uv - \frac{Z_v}{Pr} \left[\rho C_{Pf} \left(\frac{\partial T}{\partial \rho_I} + \frac{u^2 + v^2}{2} \frac{\partial T}{\partial \rho e} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + Le(h_I - h) + (1 - Le)(C_{pI} - C_{pF})T \right] \right\} \quad I = 1, ns \\
H_{1ns+3,ns+1} &= \frac{1}{J\rho} \left[W_v u + Y_v v - \frac{Z_v}{Pr} u \rho C_{Pf} \frac{\partial T}{\partial \rho e} \right] \\
H_{1ns+3,ns+2} &= \frac{1}{J\rho} \left[Y_v u + X_v v - \frac{Z_v}{Pr} u \rho C_{Pf} \frac{\partial T}{\partial \rho e} \right] \\
H_{1ns+3,ns+3} &= \frac{1}{J\rho} \frac{Z_v}{Pr} C_{pF} \frac{\partial T}{\partial \rho e} \\
H_{2ns+1,I} &= \frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} \eta_{x,v} \quad I = 1, ns \\
H_{2ns+1,ns+2} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} \eta_x \\
H_{2ns+2,I} &= \frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} \eta_{y,v} \quad I = 1, ns \\
H_{2ns+2,ns+2} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} \eta_y \\
H_{2ns+3,I} &= \frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} 2v(\eta_x u + \eta_y v) \quad I = 1, ns \\
H_{2ns+3,ns+1} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} \eta_{x,v} \\
H_{2ns+3,ns+2} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{Jy\rho} (\eta_x u + 2\eta_y v) \\
H_{3ns+2,I} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{\rho} \eta_{y,v} \quad I = 1, ns \\
H_{3ns+3,ns+2} &= -\frac{2}{3} \frac{1}{\rho} \eta_y
\end{aligned} \tag{G.3}$$

G.2. Vecteurs et matrices jacobiennes pour les termes sources

Nous rappelons la forme donnée en annexes D.1.3 des taux de production ω_I

$$\omega_I = \sum_r (\nu'_{I_r} - \nu''_{I_r}) \overline{\alpha_{I_r}} \left[-R'_r \prod_j \rho_j^{\nu'_{I_r}} + R''_r \overline{\alpha'_r} \prod_j \rho_j^{\nu''_{I_r}} \right]$$

En ne prenant en compte que la dépendance en ρ_I et en fixant la température lors de la dérivation, les trois dernières lignes ainsi que les trois dernières colonnes de la matrice jacobiennes $H_S = \partial S / \partial U$ sont nulles. Le cadran $ns \times ns$ étant défini pour $I, K = 1, ns$:

$$H_{S I, K} = \sum_r \frac{(\nu'_{I_r} - \nu''_{I_r}) \overline{\alpha_{I_r}}}{\rho_K} \left[-\nu'_{K_r} R'_r \prod_j \rho_j^{\nu'_{I_r}} + \nu''_{K_r} R''_r \overline{\alpha'_r} \prod_j \rho_j^{\nu''_{I_r}} \right]$$

Enfin pour la matrice jacobiennes DP des termes de pression \mathcal{P} , on obtient :

$$\begin{aligned} DP_{ns+2, I} &= - \left(\chi_I + \kappa \frac{u^2 + v^2}{2} \right) \quad I = 1, ns \\ DP_{ns+2, ns+1} &= \kappa u \\ DP_{ns+2, ns+2} &= \kappa v \\ DP_{ns+2, ns+3} &= -\kappa \end{aligned} \tag{H.4}$$

G.3. Discrétisation implicite

Le résidu de la discrétisation implicite des équations de Navier – Stokes en bidimensionnel plan ou axisymétrique est donné par :

$$\begin{aligned}
R_{i,j}^n = & \\
- & \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(y_{i+\frac{1}{2},j}^a \tilde{F}_{i+\frac{1}{2},j}^n - y_{i-\frac{1}{2},j}^a \tilde{F}_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left(y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \tilde{G}_{i,j+\frac{1}{2}}^n - y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \tilde{G}_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) \\
- & a \frac{\Delta t}{J_{i,j}} \mathcal{P}_{i,j}^n \\
+ & \frac{1}{Re} \frac{\Delta t}{\Delta \eta^2} \left\{ \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left(DV_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right) \right] \right. \\
& \left. - \left[y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \left(DV_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) - DV_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right) \right] \right\} \\
+ & \frac{a}{2Re} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left\{ \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left(DV_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right) \right] \right. \\
& \left. - \left[y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \left(DV_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) - DV_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right) \right] \right\} \\
+ & \frac{a}{2J_{i,j}} \frac{1}{Re} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \mu_{i,j} \left[DV_3^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) - DV_3^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right] \\
+ & \frac{\Delta t y_{i,j}^a}{J_{i,j}} S_{i,j}^n
\end{aligned} \tag{G.5}$$

Nous donnons ici l'écriture des matrices intervenant dans la linéarisation des équations de Navier – Stokes en bidimensionnel plan ou axisymétrique.

$$A^W = -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \xi} y^a \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} A_{xi-1,j}^n + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} A_{yi-1,j}^n + \Omega_{\xi-\frac{1}{2},j}^n \right]$$

$$\begin{aligned} A^S = & -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} y^a \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} A_{xi,j-1}^n + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} A_{yi,j-1}^n + \Omega_{\xi,j-\frac{1}{2}}^n \right] \\ & + \frac{1}{Re \Delta \eta} \left\{ y^a_{i,j-\frac{1}{2}} \mu_{i,j-\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{\Delta \eta} H_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) + \frac{a}{2} H_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j-1} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{a}{2J_{i,j}} \mu_{i,j} H_3^n \left(\mathcal{N}_{i,j}, U_{i,j-1} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A^N = & -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} y^a \left[\left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} A_{xi,j+1}^n + \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} A_{yi,j+1}^n + \Omega_{\xi,j+\frac{1}{2}}^n \right] \\ & - \frac{1}{Re \Delta \eta} \left\{ y^a_{i,j+\frac{1}{2}} \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left[-\frac{1}{\Delta \eta} H_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) + \frac{a}{2} H_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j+1} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{a}{2J_{i,j}} \mu_{i,j} H_3^n \left(\mathcal{N}_{i,j}, U_{i,j+1} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$A^E = -\frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \xi} y^a \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} A_{xi+1,j}^n + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} A_{yi+1,j}^n + \Omega_{\xi+\frac{1}{2},j}^n \right]$$

$$\begin{aligned}
A^p = & \frac{y_{i,j}^a}{J_{i,j}} I + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \xi} \left\{ \left[y_{i+\frac{1}{2},j}^a \left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - y_{i-\frac{1}{2},j}^a \left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] A_{xi,j}^n \right. \\
& + \left[y_{i+\frac{1}{2},j}^a \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} - y_{i-\frac{1}{2},j}^a \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i-\frac{1}{2},j} \right] A_{yi,j}^n \\
& \left. + y_{i-\frac{1}{2},j}^a \Omega_{\xi i-\frac{1}{2},j}^n + y_{i+\frac{1}{2},j}^a \Omega_{\xi i+\frac{1}{2},j}^n \right\} \\
& + a \frac{\Delta t}{J_{i,j}} DP_{i,j} \\
& + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \left\{ \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \left(\frac{\eta_x}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] A_{xi,j}^n \right. \\
& + \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j+\frac{1}{2}} - y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \left(\frac{\eta_y}{J} \right)_{i,j-\frac{1}{2}} \right] A_{yi,j}^n \\
& \left. + y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \Omega_{\eta i,j-\frac{1}{2}}^n + y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \Omega_{\eta i,j+\frac{1}{2}}^n \right\} \\
& + \frac{1}{Re} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \frac{1}{\Delta \eta} \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} H_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) + y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} H_1^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right] \quad (G.6) \\
& - \frac{1}{Re} \frac{\Delta t}{\Delta \eta} \frac{a}{2} \left[y_{i,j+\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j+\frac{1}{2}} H_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j+\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) - y_{i,j-\frac{1}{2}}^a \mu_{i,j-\frac{1}{2}} H_2^n \left(\mathcal{N}_{i,j-\frac{1}{2}}, U_{i,j} \right) \right] \\
& - \Delta t \frac{y_{i,j}}{J_{i,j}} H_{Si,j}
\end{aligned}$$

Les opérateurs implicites du premier ordre $\Omega_{\xi i+\frac{1}{2},j}$ et $\Omega_{\eta i,j+\frac{1}{2}}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\Omega_{\xi i+\frac{1}{2},j} &= \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} R_{\xi i+\frac{1}{2},j} \text{diag} \left[\psi \left(a^l_{\xi i+\frac{1}{2},j} \right) \right] R_{\xi i+\frac{1}{2},j}^{-1} \\
\Omega_{\eta i,j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} R_{\eta i,j+\frac{1}{2}} \text{diag} \left[\psi \left(a^l_{\eta i,j+\frac{1}{2}} \right) \right] R_{\eta i,j+\frac{1}{2}}^{-1}
\end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] R. Abgrall. (06/1988). *Généralisation du schéma de Roe pour le calcul d'écoulements de mélanges de gaz à concentrations variables*. La recherche aérospatiale,.
- [2] R. Abgrall and A. Merio. (04/1991) .*Calculation of an hypersonic nozzle flow*. In Work-shop on Hypersonic Flows, Part II, Antibes.
- [3] S. R. Amaratunga, O. R. Tuitty and G. T. Roberts (2000). *High-speed flow with discontinuous surface catalysis*. Journal of Fluid Mechanics , 325-359 Cambridge University Press.
- [4] Van Albada and al. (1982). J. of Astron. Astrophysics.
- [5] J. D. Anderson Jr. (1989) .*Hypersonic and high temperature gas dynamics*. McGraw-Hill.
- [6] J. Argyris, I. St. Doltsinis, H.Friz, and J.Urban (04/1991). *Preliminary results for hypersonic flows past double ellipse*. In Workshop on Hypersonic Flows, Part II, Antibes, France,
- [7] B. F. Armaly and K. Sutton. *Viscosity of multicomponent partially ionised gas mixtures*. AIAA paper, 80-1495, 1980.
- [8] B. F. Armaly and K. Sutton (1984). *Thermal conductivity of partially ionised gas*. AIAA paper, 81-1174.
- [9] B. Aupoix (06/1988). *An Introduction to real gas effects*. In AGARD-FDP-VKI Special course.
- [10] B. Aupoix and J. Cousteix (01/1989). *An Introduction to Real Gas Effects in Hypersonic Laminar Boundary Layers for Re-entry Flows*. Second Joint Europe/US Short Course in Hypersonic, Colorado Springs, CO. USA.
- [11] A. Aymer, T. Alziary, G. Carlomagno, and L.De Luca (01/1990). *Experimental study over double ellipsoid*. Workshop on Hypersonic Flows, Part I, Antibes, France.
- [12] A. Balakrishnan (1986). *Correlation for specific heats of air species to 50 000 °K*, AIAA paper, Boston, Ma, 86-1227

BIBLIOGRAPHIE

- [13] V. Bellucci, F.Grasso, and Passlacqua (04/1991) . *Numerical solution of the Navier – Stokes equations with and without non equilibrium chemistry*. Workshop on hypersonic Flows, Part II, Antibes, France.
- [14] M. Ben Artzi (1989) . *The generalized Riemann problem for reactive flows*. Journal of Comp. Physics, 81:70-101.
- [15] C. M. Bergman (1990). *Développement de méthodes numériques pour des écoulements hypersoniques non-visqueux autour d'engins spatiaux - TH/CFD/90/01*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France.
- [16] G. Billet and R. Abgrall (12/ 2003) . *An adaptive shock-capturing algorithm for solving unsteady reactive flows*. Computers & Fluids, Volume 32, Issue 10, pp:1473-1495.
- [17] G. A. Bird (1978) . *Monte Carlo Simulation of Gas Flows*. Annual review for fluid mechanics, 10(11-32).
- [18] F. G. Blottner, M. Johnson, and M. Ellis (1970) . *Chemically reacting viscous flow program for multicomponent gas mixture*. Technical report. Sc-RR-70-754, Sandia Laboratories.
- [19] J. P. Boris and D. L. Book (1973). *Flux corrected transport. Part I: SHASTA, a fluid transport algorithm that works*. Journal of computational physics, 11:38-69.
- [20] J. P. Boris and D. L. Book (1975). *Flux corrected transport. Part II: Generalization of the method*. Journal of computational physics, 18:248-283.
- [21] J. P. Boris and D. L. Book (1979). *Flux corrected transport. Part III: Minimal – error FCT algorithm*. Journal of computational physics, 20: 397-431.
- [22] I. Boyd (2001) . *Nonequilibrium chemistry modelling in rarefied hypersonic flows*. in *Chemical Dynamics in Extreme Environments*. Edited by R. A Dressler, World Scientific, Singapore, pp. 81-137.
- [23] W. R. Briley, L. K. Taylor and D. L. Whitfield (09/2003) .*High -resolution viscous flow simulations at arbitrary Mach number*. Jour. of Comp. Physics, Vol. 184, Issue 1,pp. 79-105.
- [24] R. Brun (1986). *Transport et relaxation dans les écoulements gazeux*. Physique Fondamentale et appliquée. Masson, Paris.
- [25] Th. Boussing and Murman (11/1988) . *Finite Volume Method for calculation of compressible chemically reacting flows*. AIAA Journal, 26(9):1070-1078.

- [26] G. Candler (06/1988). *The Computation of weakly ionized Hypersonic flows in thermo- chemical Nonequilibrium*. Phd Thesis, Stanford University.
- [27] S. R. Chakravarthy (01/1984). *Relaxation methods for unfactored implicit upwind schemes*. AIAA paper, Reno, Nevada, 80-0165.
- [28] S. R. Chakravarthy and S. Osher (1985). *Computing with resolution upwind schemes for hyperbolic equations*. In Lecture notes in applied Mathematics. Vol 22, Part I, pages 57-86.
- [29] A. J. Chorin (1976). *Random choice method for hyperbolic systems*. Journal of Computational physics, 22; 517-533.
- [30] P. Collela (1982). *Glimm's method for gas dynamics*. SIAM journal Sci. stat. Comput. 30: 76-110.
- [31] P. Collela, A. Majda, and V. Royburd (1986). *Theoretical and numerical structure for reacting shock waves*. SIAM journal Sci. Stat. comput. , 7:1059-1080.
- [32] P. Collela and P. Woodward (1984). *The piecewise Parabolic Method (PPM) for gas-dynamical situations*. Journal of comp. physics, 54:174-201.
- [33] F. Coquel, V. Joly, and C. Marmignon (04/1991). *Viscous non equilibrium flow calculations over à double ellipse by implicit non- centred method*. Workshop on hypersonic Flows, part II, Antibes, France.
- [34] J. L. Da Costa, D. Aymer de la chevalerie, et T. Alziary de Roquefort (1987). *Écoulement 3D hypersonique sur une combinaison d'ellipsoïde*. Rapport final. contrat n°04 RDMF.
- [35] L. Dongfang, R. A. Falconer and B. Lin (12/ 2006). *Comparison between TVD - MacCormack and ADI-type solvers of the shallow water equations* Advances in Water Resources, Vol. 29, Issue 12, pp. 1833-1845.
- [36] J. Cousteix (1978). *Couches limites laminaires en écoulement hypersonique*. cours ENSAE, Toulouse, France.
- [37] J. Cousteix (1988). *Couches limites laminaires* .Editions CEPADUES.
- [38] C. F. Curtis and J. O. Hirschfelder (1952). *Integration of stiff equations*. Mathematics, 38.
- [39] Guy de Richemont (11/1990). *Existing and new hypersonic facilities required for HERMES spacecraft testing*. 17th Congress international Council of the Aeronautical Sciences, Vol 6.5.

BIBLIOGRAPHIE

- [40] J. A. Desideri, L. Fezoui and N. Glinsky (12/1987). *Numerical computation of chemical dissociation and relaxation phenomena behind a detached strong shock*. Technical report 774, INRIA.
- [41] J. A. Desideri, N. Glinsky, and E. Hettena (1990). *Hypersonic reactive flow computations*. *Computers and Fluids*, 18(2) : 151-182.
- [42] C. Eldem (1987) . *Couches limites hypersoniques avec effets de dissociation*. Thèse ENSAE, Toulouse, France.
- [43] J. S. Evans, C. J. Schexnayder, and P. W. Huber (1970). *Computation of Ionization in Re-entry flowfield*. *AIAA journal*, 8(6): 1082-1089.
- [44] K. A. Fisco and D. R. Chapman (07/1988). *Comparison of Burnett, Super Burnett and Monte Carlo Solutions for hypersonic Shock Structure*. In 16th Int. Symp.on Rarefied Gas dynamics, Pasadena, Ca, USA.
- [45] C. Flament (11/1990). *Ecoulements de fluide visqueux en déséquilibre chimique et vibrationnel: modelization, applications internes et externes*. Thèse Univ. De Paris VI.
- [46] Jr. W. C. Gardiner (1984). *Combustion chemistry*. Springer Verlag, 1984.
- [47] P. Glaister (1988). *An approximate linearised Riemann Solver for Euler equation for real gases*. *Journal of Comp. physics*, 74:382-408.
- [48] J. Glimm (1965). *Solutions in the large for non linear hyperbolic systems of equations*. *Commun. On pure applied math.* , 18: 697-715.
- [49] N. Glinsky (11/1990). *Simulation numérique d'écoulements hypersoniques réactifs hors – équilibre chimique*. Thèse, Univ. Nice, France.
- [50] P. A. Gnoffo, R. S. Mc. Candless, and C. Yee (01/1987). *Enhancements to Program LAURA for Computation of 3D Hypersonic Flows*. AIAA paper, Reno, Ne, USA.
- [51] E. Godlewski and P. A. Raviard (1991). *Hyperbolic systems of conservation laws*. Ellipses, Paris.
- [52] S. Godunov (1959). *A difference scheme for numerical computation of discontinuous solutions of equations of fluid dynamics*. *Pat. Sb*, 47(89): 271-306.
- [53] T. Gskgen (1995). *Computation of thermochemical non equilibrium flows around a simple double ellipse*, NASA , Ames Research Center, Moffett Field, Palo Alto, California .CA CA-NCC2-420 .

- [54] D. Hänel (10/1990). *Numerical computations of viscous hypersonic flows*. 3rd Joint Europe/USA Short course in hypersonics, RWTH Aachen, FRG.
- [55] A. Harten (1993). *High resolution scheme for hyperbolic conservation laws*. Journal of Comp. Physics, 49: 357 -393.
- [56] A. Harten (1984). *On a class of high resolution Total variation stable finite difference scheme*. SIAM Jour. Numer. Anal., 21: 1-23.
- [57] A. Harten (1989). *ENO schemes with subcell resolution*. Journal of Comp. Physics 83:148-184, 1989.
- [58] A. Harten, B. Engquist, S. Osher and S. Charavarthy (1987). *Uniformly high order accurate nonoscillatory schemes*. Part III. Journal of Comp. physics, 71: 231-303.
- [59] A. Harten and J. M. Hyman (1981). *A self adjusting grid for the computation of weak solutions of hyperbolic conservation laws*. Technical Report LA9105, Los Alamos national Lab.
- [60] A. Harten and P. Lax (1981). *A random choice finite – difference schemes for hyperbolic conservation laws*. SIAM Jour. Numer. Analysis, 18: 289 – 315.
- [61] A. Harten, P. Lax, and B. van Leer (01/1983). *On Upstream Differencing and Goudunov Type schemes for hyperbolic Conservation Laws*. SIAM review, 25: 35 – 61.
- [62] A. Harten and S. Osher (04/1987). *Uniformly high order accurate no oscillatory schemes*. Part I. SIAM Jour. Numer. Analysis, 24(2): 279-309.
- [63] J. O. Hirschfelder, Ch. F. Curtiss, and R. B. Bird (1954). *Molecular theory of gases and liquids*. John Willey and Sons, New York, USA..
- [64] H. Hornung (10/1990). *High Enthalpy facilities*. 3rd Joint Europe/USA short course in hypersonic, RWTH Aachen, FRG.
- [65] O. P. Jaquotte (1987). *A new mechanical approach for grid generation in computational fluid dynamics*. TP 1987-174, ONERA.
- [66] M. K. Kadalbajoo and R. Kuma (04/2006) . *A high resolution total variation diminishing scheme for hyperbolic conservation law and related problems*. Appl. Math. and Comp. , Vol. 175, Issue 2, , pp. 1556-1573.
- [67] G. Koppenwallner (1988) . *Aerothermodynamik. Ein schlüssel zu neuen Transport geräten der luft-und Raumfahrt*. AFW, 12:6-18 .

BIBLIOGRAPHIE

- [68] W. Kordulla (1988). *Computational Techniques for hypersonic flows*. AGARD*FDP-VKI special course.
- [69] W. Kordulla (01/1989). *Numerical simulation of 3D hypersonic viscous flows*. 2nd Joint Europe/USA short course in hypersonics, Colorado spring, Co, USA.
- [70] W. Kordulla, S. Riedelbauch, G. Brenner and U. Prinz (12/1992) . *Hypersonic viscous flow simulations* Vol 10, Issues 4-6, Fluid Dynamics Research, Pages 451-468.
- [71] S. Kuskov (1970). *First order quasilinear equations in several independents variables*. Mat. Sb. , 123:228 – 255 .
- [72] B. Laboudigue (12/1990). *Modèles et calculs de couches de choc hypersoniques réactives*. Thèse de l'E.S.Paris.
- [73] A. Lafon (08/1990). *Calcul de la couche de choc*. Rapport technique 34/5005.32, CERT/DERAT.
- [74] A. Lafon (03/1990). *Calcul d'écoulements visqueux hypersoniques*. Rapport technique 34/5005.22, CERT/DERAT.
- [75] A. Lafon and R. Perrel (04/1991). *Contribution to test case VI*. Workshop on hypersonic flows, Part II, Antibes, France.
- [76] A. Lafon and Yee (07/1991). *Dynamical approach study of spurious steady-state numerical solution of non linear differential equations, Part III: The effects of non linear source terms and boundary conditions in reaction – convection equations*. Technical report TH-103877, NASA.
- [77] B. Larrouturou (08/1989). *How to preserve the masse fractions positivity when computing compressible multi component flows*. RR: 1080, INRIA. .
- [78] P. Lax (1954). *Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computing*. Commun. Pure. Appl. Math., 7:159-193.
- [79] P. Lax (1957). *Hyperbolic systems of Conservation Laws, part II*. Commun. Pure Appl. Math., 10: 537-566.
- [80] R. J. LeVeque (2002), *Finite volume methods for hyperbolic problems*, Cambridge Univ. Press.
- [81] R. J. LeVeque, M. Pelanti (2001). *A class of approximate Riemann solvers and their relation to relaxation schemes*, J. Comput. Phys. **172**: 572-591.
- [82] R. J. LeVeque and H. C. Yee (03/1988). *A study of numerical Methods for Hyperbolic conservation Laws with stiff source Terms*. Jour. Of Comp. Physics, 86: 187-210, 1990. Also NASA TM 100075.

- [83] M. S. Liou, B. Van leer, and J.S. Shuen (04/1988). Splitting of Inviscid Fluxes for Real Gases. Jour. Of Comp. physics, 87: 1-24, 1990. Also NASA TM 100857.
- [84] Y. Liu and M. Vinokur (08/1989). *Nonequilibrium Flow Computation. Part I: an Analysis of Numerical Formulations of conservation Laws*. Jour. Of Comp. Physics. 83: 373-397.
- [85] R. K. Lobb (1964). *Experimental measurement of shock detachment distance on spheres fired in air at hypervelocities. The high temperature Aspects of Hypersonic Flows*. Pergammon Press. Mac Millan Co. NY, USA.
- [86] R. W. Mac Cormack and D. R. Chapman (01/1990). *Improved Computational Fluid Dynamics for Continuum Hypersonic Flow*. Technical report, Stanford University, 01/1990.
- [87] A. A. Maslov, V. T. Poplavskaya and B. V. Smorodsky (2004). *Stability of a hypersonic shock layer on a flat plate*. Comptes Rendus Mecanique, Volume 332, Issue 11, November 2004, Pages 875-88
- [88] A. Merlo (1990). *Calculs d'écoulements hypersoniques réactifs non visqueux en déséquilibre chimique et vibratoire*. Université de Nice, DEA de Mathématique.
- [89] F. Monooyer (04/1991) . Cases VI.1 and VI.8 : *ellipsoïd. Euler- bounadary layer calculation*. Workshop on Hypersonic Flows, Part II, Antibes, France.
- [90] J. L. Montagné, H. C. , G. H. Klopfer , and M. Vinokur (1988) . *Hypersonic Blunt Body computations including Real Gas Effects*. Technical report TM 100074, NASA.
- [91] J. L. Montagné, H. C. Yee and M. Vinokur (07/1987). *Comparative Study of High Resolution Shock Capturing Schemes for Real Gas*. Tehnical report TM 100004, NASA.
- [92] J. N. Moss (01/1989). *Computation of flow Fields for Hypersonic Flight at high altitudes*. 2nd Joint Europe/USA short course in Hypersonics . Colorado Springs, Co.
- [93] H. Nishikawa and B. van Leer (09/2003) . *Optimal multigrid convergence by elliptic/hyperbolic splitting*. Journal of Computational Physics, Volume 190, Issue 1, pp. 52-63.
- [94] O. Oleinik (1957). *Discontinuous solutions of nonlinear differential equations*. Usp. Math. Nauk. 12:3-73.
- [95] S. Osher (1990). *Numerical methods from centred schemes to ENO*, CERFACS short course; Computational Fluid Dynamics: theory and application in computer code.
- [96] S. Osher and P. K. Sweby (1990). *Recent developments in the numerical solution of non linear conservation laws*.

BIBLIOGRAPHIE

- [97] C. park (01/1985). *On convergence of Computation of chemical reacting Flows*. AIAA 23 rd Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada, USA.
- [98] C. Park (1990). *Nonequilibrium hypersonic Aerothermodynamics*. John Willey and sons.
- [99] B. Perthame, C. Simeoni (2003), *Convergence of the upwind interface source method for hyperbolic conservation laws*, Proc. of Hyp2002, T. Hou and E. Tadmor Editors, Springer.
- [100] F. Perrel and A. Lafon (01/1990). *TVD schemes for a mixture of reacting gases*. Technical report TR/RF/14, CERFACS, 01/1990.
- [101] M. Pfitzner (04/1991). *Inviscid non equilibrium flow over a double ellipse*. Workshop on hypersonic flows, Part II, Antibes, France.
- [102] T. H. Pulliam and J. L. Steger (02/1980). *Implicit finite difference simulations of 3D compressible flow*. AIAA journal, 18(2):159-167.
- [103] P. Roe (1981). *Approximate Riemann Solvers, parameters vectors and differences schemes*. Journal of Comp. Physics, 43: 357-372.
- [104] P. Roe. *Some contributions to the modelling of discontinuous flows*. In Lecture notes in applied Mathematics, Vol 22, Part II, pages 163-193.
- [105] P. Roe, K. Powel, H. Deconnick, and R. Struijs (1991). *Multidimensional schemes for scalare advection*. AIAA 10th CFD Conf. Hawaii, .AIAA 91-1532.
- [106] P. Roe and M. Arora (1991). *Design of algorithms for a dispersive hyperbolic problem*. AIAA 10th CFD Conf. Honolulu, Hawaii, AIAA 91-1535.
- [107] M. A. Rudgyard (1990). *Cell vertex methods for compressible gas flows*. PhD thesis, Oxford.
- [108] M. V. Savetti, M. C. Ciccoli, and J. A. Desideri (04/1991). *Nonequilibrium inviscid and viscous flows over the double ellipse by adaptive upwind elements*. Workshop on hypersonic flows, Part II, Antibes, France.
- [109] M. Sawley and S. Wüthrich (1991). *The computation of radiating and chemically – reacting hypersonic boundary layer flows*. Technical report IMHEF, EPFL.
- [110] M. Sawley and S. Wüthrich (04/1991). *Computation of viscous hypersonic flow over a double ellipse using a coupled Euler/boundary layer method*. Workshop on Hypersonic flows, Part II, Antibes, France.

- [111] M. Sawley and S. Wüthrich (05/1991) *.Non Equilibrium hypersonic flow simulation using a coupled Euler/boundary method.* 1st European Symposium on aerothermodynamics for space vehicles, ESA.
- [112] M. Sawley and S. Wüthrich (1991). *Non equilibrium hypersonic flow simulations using the second order boundary layer equations.* WCCM II [World congress on computational mechanics] N^o2, vol. 89, n^o 1-3 (21 ref.), pp. 129-140, Stuttgart, Germany.
- [113] T. Schwartzkopff, C. D. Munz, E. F. Toro (12/2002) *. A High-Order Approach for Linear Hyperbolic Systems in 2D.* Journal of Scientific Computing, v.17 n.1-4, p.231-240, 12/ 2002
- [114] C. D. Scott (10/1990). *Wall catalytic recombination and boundary conditions in non equilibrium hypersonic flows with applications.* 3rd joint Europe/USA short course in hypersonics, RWTH Aachen, FRG, 10/1990
- [115] B. Sjögren and H. C. Yee (2002), *Analysis of High Order Difference Methods for Multiscale Complex Compressible Flows* Proceedings of the HYP2002 conference, March 25-29 2002, Pasadena, California, US.
- [116] B. Sjögren and H. C. Yee (2003). *Low Dissipative High Order Numerical Simulations of Supersonic Reactive Flows* Int. J. Num. Math. Fluids, 43, pp. 1221-1238.
- [117] B. Sjögren, H. C. Yee (2004) *.Multiresolution Wavelet Based Adaptive Numerical Dissipation Control for High Order Methods.* J. Sci. Comput. 20(2): 211-255 , 2004
- [118] J. L. Shin, J. N. Moss and A. L. Simmonds (1982). *Viscous shock layer heating analysis for the shuttle winward plane with surface finite catalytic recombination rates.* AIAA- 82-0842, 1982.
- [119] S. W. Shu (1987). *TVB uniformly high order schemes for conservation laws.* Math. Comp. , 49(179): 105-121, 1987
- [120] S. W. Shy and S. Osher (08/1988). *Efficient implementation of essentially non oscillatory shock capturing schemes.* Journal of Comp. physics, 77(2): 439-471, 08/1988.
- [121] S. W. Shu and S. osher (07/1989). *Efficient implementation of essentially non oscillatory shock capturing schemes.* Part II. Journal of Comp. physics 83(1): 32-78, 07/1989.
- [122] J. Wang, H. Wen, T. Zhou (2004) *. On large time step Godunov scheme for hyperbolic conservation laws.* Comm. Math. Sci. Vol. 2, No. 3, pp. 477- 495.

BIBLIOGRAPHIE

- [123] J. S. Shyen, M. S. Liou, and B. van leer (1990) . *Inviscid flux splitting algorithms for real gases with non equilibrium chemistry*. Journal of Comp. physics, 90: 371-395.
- [124] Smoler (1983). *Shock waves and reactions – diffusion equations*, spriger- Verlag.
- [125] J. L. Steger and R. F. Warming (1981). *Flux vector splitting of the inviscid gas dynamic equations with applications ti finite difference methods*. Journal of Comp. physics, 40: 263-293.
- [126] D. Straub (1972) . *Exakte gleichungen für die Transportkoeffizienten eines Fünfkomponentengemisches als Modellgas dissoziierter luft*. Technical report DLR-FB 72-34, Deutsche Luft und Raumfahrt.
- [127] D. Straub and al (1972) . *Stationäre laminare hyperschallgrenzcchichten um ein Rotationshyperboloid bei thermochemischem Gleichgewicht des Luft*. Technical Report, DLR-FB 72-16, Deutsche Luft und Raumfahrt.
- [128] R. Struijs, H. Deconinck, P. De Palma, P. Roe, and K. Powell (1991). *Progress on multidimensional upwind Euler solvers for unstructured grids*. AIAA, 10th CFD conf. Hawai, AIAA 91-1550.
- [129] P. K. Sweby (1984). *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*. SIAM J. Numerical analysis, 21: 995-1011.
- [130] J. Talandier (1989) . *Extension du solveur de osher au cas d'un mélange de gaz reels hors équilibre chimique*. Paris VI. France.
- [131] J. C. Tannehill D. A. Anderson, , and R. H. Pletcher (1997) , *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, 2nd Ed., Taylor & Francis.
- [132] D. A. Throckmorton (01/1982). *Benchmark aeroheating data from the first flights of space shuttle orbiter*. AIAA paper n°82-0003.
- [133] E. F. Toro,, and V. A. Titarev,. (2002). *Solution of the generalised Riemann problem for advection- reaction equations*. Proc. Roy. Soc. London A, **458**, 271-281.
- [134] E. F. Toro, , and V. A. Titarev, (2005) .*TVD Fluxes for the High-Order ADER Schemes*. Volume 24 , Issue 3 Plenum Press New York, NY, USA
- [135] B. Van leer (1973). *Toward the ultimate finite difference scheme Part I*. Lecture notes in Physics, 18: 163-168.
- [136] B. Van Leer (1974). *Toward the ultimate finite difference scheme Part II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme*. Journal of Comp. Physics, 14: 361-371.

- [137] B. Van Leer (1977). *Toward the ultimate finite difference scheme Part III*. Upstream – centred finite difference schemes for ideal compressible flow. *Journal of Comp. Physics*, 23: 263-275.
- [138] B. Van Leer (1977). *Toward the ultimate finite difference scheme Part VI*. A New approach to numerical convection. *Journal of Comp. Physics*, 23: 276-299.
- [139] B. Van Leer (1979). *Toward the ultimate finite difference scheme Part V*. A second order scheme to Godunov method. *Journal of Comp. Physics*, 32: 101-136, 1979.
- [140] B. Van Leer (09/1982). *Flux – vector splitting for the Euler equations*. Technical Report 82-30, ICASE, 09/1982.
- [141] M. Vetter, H. Olivier, and H. Gröning (04/1991). *Flow aover double ellipsoid and sphere experimental results*. Workshop on hypersonic flows, Part II, Antibes, France.
- [142] W. G. Vincenti and Ch. H. Kruger (1965). *Introduction to physical gas dynamics*. Robert E. Krieger, Florida, USA.
- [143] M. Vonokur (1974). *Conservative equations of gas dunamics in curvilinear coordinate Systems*. *Journal of Comp. Physics*, 14: 105-125.
- [144] M. Vinokur (12/1988). *Flux jacobian matrices and generalized Roe average for an equilibrium real gas*. Technical Report CR 177512, NASA Ames RC.
- [145] M. Vinokur and J. L. Montagné (1990). *Généralized flux vector splitting and Roe average for an equilibrium real gas*. *Journal of Comp. Physics*, 89(2):276-300.
- [146] J. B. Vos and C. M. Bergman (1991). *Chemical equilibrium and non equilibrium inviscid flow simulations using an explicit scheme*. *Comp. Phys... Commun*, 65: 289-298.
- [147] R. F. Warming and R. M. Beam (1976). *Upwind second order difference schemes and applications in aerodynamics*. *AIAA journal*, 14: 1241-1249.
- [148] C. R. Wilke (04/1950). *A Viscosity Equation for Gas Mixture*. *Journal of chemical Physics*, 18(4).
- [149] P. Woodward and P. Collela (1984). *The numerical simulation of 2D fluid flow with strong shock*. *Journal of Comp. Physics*, 54: 115-173.
- [150] Workshop on Hypersonic Flows for Re entry Problems, part I, Antibes, France, Org. INRIA et GAMNI-SMAI. 01/1990
- [151] Workshop on Hypersonic Flows for Re entry Problems, part II, Antibes, France, Org. INRIA et GAMNI-SMAI. 04/1991

BIBLIOGRAPHIE

- [152] R. F. Walter (04/1993). *Recent advances in computational analysis of hypersonic vehicles*. Volume 29, N° 3, Combustion, Explosion and Shock Waves, Spriger-Verlag .
- [153] P. Wesseling, (2001), *Principles of Computational Fluid Dynamics*, Springer-Verlag
- [154] S. Wüthrich M. L. Sawley . *Coupled Euler/boundary-layer method for non equilibrium, chemically reacting hypersonic flows*. AIAA journal ISSN 0001-1452 vol. 30, n°12, pp. 2836-2844, 1992
- [155] S. Wüthrich, F. Perrel, M.L. Sawley, and A. Lafon (1994). *Hypersonic flow in chemical non equilibrium: Comparison of thin layer Navier-Stokes and coupled Euler /boundary layer computations*. Computers and Fluids,
- [156] H. C. Yee (1983). *Application of second-order-accurate total variation diminishing (TVD) schemes to the Euler equations in general geometries* .Ames Research Center.
- [157] H. C. Yee (05/1987). *Upwind and symmetric shock capturing schemes*. Technical Report TM 89464, NASA.
- [158] H. C. Yee and A. Harten (02/1987). *Implicit TVD schemes for Hyperbolic conservation laws in curvilinear coordinates*. AIAA Journal, 25(2) : 266-274.
- [159] H. C. Yee, P. K. Sweby, and D. F. Griffiths (1990). *Dynamical approach study of spurious steady- state numerical solutions of non linear differential equations*. Journal of Comp. Physics, NASA- TM-102820.
- [160] H. C. Yee (02/1985), R. F. Warming, and A. Harten. *Implicit Total Variation Diminishing TVD schemes for steady state calculations*. Journal of Comp. Physics, 57(3): 327-360.
- [161] H. C. Yee (04/1989). *A class of high resolution explicit and implicit stick capturing methods*. VKI Lecture Series.
- [162] H. C. Yee (1998). *Low dissipative high order shock-capturing methods using characteristic-based filters* . Research Institute for Advanced Computer Science, NASA Ames Research Center, National Technical Information Service.
- [163] H. C. Yee (1999). *Entropy splitting and numerical dissipation* .NASA Ames Research Center, Available from NASA Center for AeroSpace Information.

- [164] H. C. Yee, B. Sjögren, N. D. Sandham, and A. Hadjadj (2000) , *Progress in the Development of a Class of Efficient Low Dissipative High Order Shock-Capturing Methods*, Proceedings of the Symposium in Computational Fluid Dynamics for the 21st Century, July 15-17, 2000, Kyoto, Japan.
- [165] H. C. Yee (2000), M. Vinokur, M., and M.J. Djomehri, *Entropy Splitting and Numerical Dissipation*, J. Comput. Phys., 162 - 33-81
- [166] J. M. Yos (1963). *Transport properties of nitrogen, hydrogen, oxygen and air to 30 000°K*. Technical report TM-63-7, AZVCO RAD...
- [167] C. B. Yaney (1998) .*Computational Gas dynamics* . Cambridge University Press

RESUME

Une des contraintes majeure intervenant dans la conception et le dimensionnement de la protection thermique d'un véhicule hypersonique est liée à l'échauffement de la paroi. Les différentes causes à l'origine de cet échauffement sont : la présence de chocs forts au sein de l'écoulement, la dissipation visqueuse dans les couches limites et les effets de thermochimie. L'élévation de la température dans la couche de choc a des conséquences multiples ; sur lesquelles on peut relever en particulier : d'une part , une modification des propriétés thermodynamiques de l'air et l'apparition des réactions chimiques entre ses différents composants , D'autre part, l'importance de la différence de température entre la paroi et l'écoulement est source de flux de chaleur internes, transmis en partie à la paroi à travers la couche limite.

La condition à la paroi des équations de bilan des espèces est étroitement liée aux interactions qui peuvent avoir lieu entre les espèces qui forment le mélange gazeux et le matériau qui constitue la paroi. De ce fait, La paroi peut participer comme un corps catalytique aux réactions chimiques qui ont lieu au sein du mélange.

Un des outils numériques permettant une telle prédiction est constitué par les méthodes de résolution des couches limites hypersoniques. Tout en tenant compte de certains phénomènes physiques propres aux écoulements hypersoniques tels que : l'existence de forts gradients normaux de vitesse à la frontière de la couche limite et le phénomène d'interaction visqueux provoqué par l'épaississement de la couche limite et par la minceur de la couche de choc. Par conséquent , il s'avère intéressant de développer une simulation numérique de la couche de choc complète sur différentes configurations géométriques ,frontale et pariétale, spécifiques aux véhicules spatiales ; ce qui nous donnera la possibilité d'étudier : d'une part, les variations du flux de chaleur, de la pression, des contraintes et des concentrations de certaines espèces qui rentrent dans la constitution de l'atmosphère pour différents nombres de Mach ; et d'autre part , l'analyse de la sensibilité de la couche limite hypersonique par rapport au pouvoir catalytique et à la température de la paroi , aux différents modèles de représentation des réactions chimiques ou à la représentation des termes de transport par diffusion ; sachant que l'écoulement peut être a priori en déséquilibre thermodynamique et chimique localement

Les travaux effectués dans le cadre de cette recherche concernent la simulation d'écoulements hypersoniques visqueux réactifs sur des géométries bidimensionnelles (plans ou axisymétriques) la modélisation adoptée conduit aux équations de Navier-Stokes étendues à un mélange de gaz réactifs et l'approximation dite de couche mince a été introduite du fait que les écoulements a étudier présentent une direction privilégiée. Pour la fermeture des équations. Les résultats de la théorie cinétique des gaz simplifiée ont été utilisé grâce à certains modèles chimiques (GARDINER, NASA, PARK, STRAUB.. etc.) quant à la résolution numérique elle s'est appuyé sur la classe de schémas à propriété TVD car ils permettent de capturer les ondes de chocs sans introduire d'oscillation parasites tout en assurant une bonne précision de la solution.

S U M M A R Y

One of the major constraints to design and to fix dimensions of the thermal protection of hypersonic vehicles is linked up to the wall overheating. The Various causes representing the source of this overheating are: the presence of strong shocks in the bosom of the flow, viscous dissipation into boundary layers and the effects of thermo-chemistry. The growth of the temperature in the shock layer has multiple consequences; on which and in particular we can take notice of: on the one hand, the modification of the air thermo dynamical properties and the appearance of chemical reactions among its different components, and on the other hand, the large temperature gap between the wall and the flow is a flux source of internal heating, which is partially transmitted across the boundary layer to the vehicle's walls.

The wall's condition of species balance-sheet equations are tightly linked up to interactions that can take place among species which constitute the gaseous mixture and the wall's material, thus, the wall can participate as an catalytic body to chemical reactions that could take place in the bosom of the mixture.

One of the numerical tools that permit such prediction is made up from hypersonic boundary layers solving methods. In which we have considered some physical phenomena peculiar to hypersonic flows such as: the existence of strong normal gradient of velocity at the boundary layer's borders and viscous interactions phenomena issued from the thickness of the boundary layer and the thinness of the shock layer.

Consequently, we concluded that it would be more interesting to develop a numerical simulation of the entire shock layer on various frontal and parietal geometric configurations specific to space vehicles. Which will allow us to investigate, besides the change on the flux of the heat, the pressure, constraints and concentrations of some air species for various flow mach numbers, the Sensibility of the hypersonic boundary layer with respect to the catalytic power, the wall temperature, various models of chemical reactions and the form of the transport terms by diffusion; keeping in mind that locally the analysed flow can be a priori thermodynamically and chemically in non-equilibrium state.

This research concerns the numerical simulation of viscous and reactive hypersonic flows over two dimensional bodies (plan and axis symmetrical design). The mathematical modelling adopted leads to the Navier - Stokes equations, extended to a mixture of reactive gases with the introduction of the thin layer approximation concept. The final equations system was ended by inserting results of some chemical models developed on the kinetic gas simplified theory (GARDINER, NASA, PARK, and STRAUB... so on). The numerical resolution was essentially based on schemes class that have the total variation diminishing (TVD) property which enable the shock waves capture without introducing parasitic oscillations and assure a good precision of the final solution.

ملخص

إن إحدى القيود الرئيسية لتصميم و تثبيت أبعاد الحماية الحرارية للمركبات الفضائية الفرطصوتية (Hypersonic) ترتبط أساسا بالتزايد المفرط في تسخين جدرانها. الأسباب المختلفة التي تتسبب في هذه الزيادة في التسخين هي: وجود الموجات الصدمة القوية في قلب الجريان، التبديد اللزج بطبقات الحد و المؤثرات الحرارية الكيميائية. إن ارتفاع درجة الحرارة ضمن طبقة الموجة الصدمة له تأثيرات متعددة. حيث يمكننا أن نلاحظ بشكل خاص تعديل الخصائص الحرارية و الديناميكية للهواء و ظهور تفاعلات كيميائية ما بين مختلف عناصره من جهة، و من جهة أخرى ، يعتبر الفرق الكبير في درجة الحرارة بين جدران المركبة و الجريان مصدر تدفق لتسخين داخلي الذي يرسل جزئيا عبر الطبقة الحدية إلى حيطان المركبة .

يخضع الشرط الحائطي إلى معادلات تقويم الأنواع و بصفة مباشرة إلى التفاعلات التي يمكن أن تحدث بين الأنواع المكونة للخليط الغازي و المادة المكونة لحائط المركبة، هكذا يمكن الحائط أن يشارك كعامل مساعد للتفاعلات الكيميائية التي يمكن أن تحدث ضمن الخليط الغازي.

تتنبق إحدى الوسائل الرياضية العددية التي تسمح لمثل هذا التنبؤ من طرق الحل للطبقات الحدية التي تنشأ من الجريان الفرطصوتي (Hypersonic) و الذي اتخذنا فيه بعين الاعتبار بعض الظواهر الفيزيائية الخاصة بهذه الفصيلة من الجريان مثل: وجود ميل قوي عمودي للسرعة على حدود الطبقة الحدية و ظاهرة التفاعلات اللزجة الناتجة عن سماكة الطبقة الحدية و نحافة طبقة الموجة الصدمة .

لذلك ارتأينا أن نطور رياضيا المحاكاة العددية لكامل طبقة الموجة الصدمة التي تتواجد على الوجه الأمامي و الجداري لتشكيلات الهندسية الخاصة بالمركبات الفضائية التي سوف تسمح لنا للتحقيق في حساسة الطبقة الحدية الناتجة عن جريان الفرطصوتي (Hypersonic) و ذلك بالنسبة إلى قوة العامل المساعد ، درجة حرارة الجدار، النماذج المختلفة للتفاعلات الكيميائية و شكل الحدود التي تمثل النقل بالانتشار، على غرار التدفق الحراري ، الضغط ، الإجهاد و تركيز بعض مكونات التدفق الهوائي لمختلف قيم عدد ماخ (Mach)، بدون أن ننسى أنه يمكن أن يكون التدفق المحلل محلليا بدهاءة في حالة غير موازنة من الناحية الديناميكا الحرارية و الكيميائية.

يتعلق العمل المنجز في هذا البحث بالمحاكاة العددية لتدفق جريان فرطصوتي ، لزج و تفاعلي) على أجسام ثنائية الأبعاد (تصاميم سطحية و ذوي تناظر محوري) . يتطلب النموذج الرياضي المتبني في هذا البحث استعمال معادلات Navier - Stokes الممتدة إلى مجال خليط الغازات التفاعلية مع إدماج المفهوم التقريبي للطبقة الرقيقة. كما تم استكمال جملة المعادلات النهائية بإدخال نتائج بعض النماذج الكيماوية التي طورت من خلال المفهوم النظري المبسط لحركية الغازات (TRAUB, NASA, PARK, GARDINER ... الخ)، و يستند الحل العددي أساسا على صنف المخططات الذي يملك خاصية التغير الكلي المتناقص (TVD) حيث تسمح هذه الأخيرة بأسر الموجة الصدمة دون إدخال التذبذبات الطفيلية، كما لها القبلية على تأمين الدقة الجيدة للحل النهائي.