

4.629.1.1

4.629.1.158.1

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DE SAAD DAHLEB BLIDA 1  
INSTITUT D'AERONAUTIQUE ET DES ETUDES SPATIALES



**PROJET DE FIN D'ETUDES**

En vue de l'obtention du Diplôme de MASTER en Aéronautique

Option : Propulsion avions

**SIMULATION NUMERIQUE  
D'ECOULEMENTS HYPERSONIQUES EN  
HORS-EQUILIBRE THERMOCHIMIQUE  
DERRIERE UNE ONDE DE CHOC INTENSE**

Fait par :  
OUCHENE Samir  
GHENDOUR Nabil

Dirigés par :  
ALLOUCHE Rachid : Promoteur  
RENANE Rachid : Co-promoteur

Blida, Septembre 2015

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DE SAAD DAHLEB BLIDA 1  
INSTITUT D'AERONAUTIQUE ET DES ETUDES SPATIALES

## **PROJET DE FIN D'ETUDES**

En vue de l'obtention du Diplôme de MASTER en Aéronautique

Option : Propulsion avions

# **SIMULATION NUMERIQUE D'ECOULEMENTS HYPERSONIQUES EN HORS-EQUILIBRE THERMOCHIMIQUE DERRIERE UNE ONDE DE CHOC INTENSE**

Fait par :

**OUCHENE Samir  
GHENDOUR Nabil**

Dirigés par :

**ALLOUCHE Rachid : Promoteur  
RENANE Rachid : Co-promoteur**

Blida, Septembre 2015



## RESUME

Dans le cadre des phénomènes qui interviennent à l'aval d'une onde de choc intense, qui sont rencontrés généralement à des vitesses hypersoniques, On présente dans ce travail la relaxation de vibration et de dissociation des espèces chimiques constituant le mélange d'air à haute température. On s'intéresse, en particulier, à la simulation de l'écoulement dans la couche de choc qui est le siège des phénomènes de déséquilibre thermochimiques intenses, pour cela, on a considéré deux études ; dans la première étude, un code Fortran et Visual Basic est réalisé pour simuler un écoulement unidimensionnel en déséquilibre vibrationnel et chimique derrière une onde de choc droite détachée. La deuxième étude porte sur la simulation d'un écoulement bidimensionnel et visqueux en déséquilibre chimique avec la prise en compte des modèles de turbulence en utilisant ANSYS Fluent 14.5, autour de la sphère de Lobb et de la double ellipse modélisant le nez d'une navette spatiale. Les résultats trouvés sont en accord avec la littérature scientifique et ils présentent une bonne concordance.

**Mots clés:** Ecoulement hypersonique, onde de choc, dissociation, équations d'Euler, équations de Navier-Stokes, turbulence.

## ABSTRACT

As a part of the non-equilibrium phenomena which occur behind a strong shock wave, In general, these phenomena observed at hypersonic velocities, We present in this work the vibrational relaxation and the dissociation of the air mixture in a high temperature. Particularly, we interest to the simulation of the flow in the shock layer where the intense thermochemical non-equilibrium phenomena occur, in order to achieve this, we have considered two studies; in the first study, we carried out a Fortran & visual basic code to simulate a one-dimensional flow of air mixture in a thermochemical non-equilibrium behind a strong detached shock wave. In the second case, we have simulated a two-dimensional viscous air flow in a chemical non-equilibrium with taking into account the turbulence models using ANSYS Fluent 14.5 around the Lobb's sphere and the double ellipsoid modeling a space shuttle's nose. The results obtained present a good agreement with the scientific literature.


**Keywords:** Hypersonic flow, shock wave, dissociation, Euler equations, Navier-Stokes equations, turbulence.

## ملخص

في إطار الظواهر التي تحدث خلف موجة صدم قوية، والتي تلاحظ عند سرعات فوق صوتية و عالية جدا. نقدم في هذه الدراسة الاسترخاء الاهتزازي و التفكك لمختلف العناصر المكونة للهواء في درجات حرارة عالية. و بالخصوص، اهتمنا في دراستنا بمحاكاة السيلان في المنطقة المحصورة خلف موجة الصدم و مقدمة المركبة، لهذا الغرض، قمنا باعتبار دراستين. في الأولى، قمنا بإنجاز برنامج لمحاكاة سيلان العناصر المكونة للهواء في حالة لا توازن ترموكيميائي وفي بعد واحد خلف موجة صدم قوية و منفصلة، أما في الحالة الثانية فقد قمنا بمحاكاة سيلان الهواء لكن مع الأخذ بالاعتبار للزوجة و في فضاء ذو بعدين و في حالة لا توازن كيميائي حول كرة لوب و جسم مكون من شكلين بيضاويين. ينمذج مقدمة مركبة فضائية، هذه الأخيرة قمنا بها بواسطة برنامج ANSYS Fluent 14.5 مع الأخذ بعين الاعتبار، كذلك، نماذج الاضطراب (الْتَمُور). النتائج المحصل عليها توافق بشكل جيد النتائج المحصل عليها في المنشورات العلمية.

كلمات مفتاحية: سيلان ما فوق صوتي، موجة صدم، التفكك، معادلات أويلر، معادلات نافيه-ستوكس، اضطراب (تَمُور).





## *Remerciements :*

*C'est avec un très grand honneur que nous réservons cette page en signe de gratitude et de reconnaissance à tous ceux qui nous ont aidés de près ou de loin à la réalisation de ce projet.*

*Ce travail s'est effectué sous la direction de Monsieur DR. RACHID ALLOUCHE et Monsieur DR. RACHID RENANE, qui ont su si judicieusement orienter nos travaux et doser leurs encouragements et leurs critiques. Qu'ils trouvent dans ce mémoire un témoignage de tout notre respect et de notre sincère reconnaissance.*

*Nos remerciements s'adressent également au président du Jury ainsi que les membres du jury pour l'honneur qu'ils nous font en acceptant d'évaluer notre travail.*

*Nous remercions tous nos profs qui ont contribué à notre formation durant toutes les années.*

*Nous remercions également Amir et Rami pour leur aide durant la phase finale de ce mémoire.*

OUCHENE Samir  
GHENDOUR Nabil

*On vous dit : " Merci Beaucoup "*





## **Dédicaces**

**J'adresse mes remerciements les plus sincères à mes très chers parents qui ont contribué à l'élaboration de ce modeste travail.**

**A mes frères, mes sœurs.**

**A mes amis (Hicham, Fayssal, Nouredine).**

**A Mr. S.Z**

**A mes professeurs.**

**Je dédie ce mémoire.**

**OUCHENE Samir**

**A mes très chers parents qui ont toujours été là pour moi, et qui m'ont donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance.**

**A mes frères et mes sœurs.**

**A mes meilleurs amis**

**A mes professeurs**

**Je dédie ce mémoire**

**GHENDOUR Nabil**

## TABLE DES MATIERES

RESUME.....	I
REMERCIEMENTS.....	II
DEDICACES.....	III
TABLE DES MATIERES.....	IV
NOMENCLATURE.....	V
LISTES DES FIGURES ET TABLEAUX.....	VI
INTRODUCTION.....	1
1 CARACTERISATION ET DESCRIPTION DES ECOULEMENTS DE RENTREES HYPERSONIQUES.....	6
1.1 Introduction.....	7
1.2 Caractérisation des écoulements.....	7
1.2.1 Le régime de vitesse :.....	8
1.2.2 Le comportement dynamique.....	9
1.2.3 Le régime d'écoulement.....	9
1.3 Echelles de temps caractéristiques.....	11
1.3.1 Nombre de Dàmkohler.....	12
1.4 Ondes de choc droites.....	12
1.4.1 Relations de Rankine-Hugoniot.....	13
1.5 L'onde de choc détachée.....	16
1.5.1 Physique des gaz réels.....	17
1.6 Conclusion.....	18
2 MODELISATION MATHEMATIQUE ET PHYSIQUE D'UN ECOULEMENT EN DESEQUILIBRE THERMOCHIMIQUE.....	19
2.1 Introduction.....	20
2.2 Les équations de conservation.....	21
2.2.1 Conservation des espèces chimiques.....	21
2.2.2 L'équation de continuité globale.....	21
2.2.3 Conservation de la quantité de mouvement.....	21
2.2.4 Conservation de l'énergie vibrationnelle :.....	22
2.2.5 Conservation de l'énergie totale.....	22
2.3 Hypothèses.....	23
2.3.1 Les équations simplifiées.....	25



2.3.2	La formulation conservative non linéaire.....	25
2.4	Modélisation thermochimique.....	27
2.4.1	Les relations thermodynamiques.....	27
2.4.2	Le modèle de la cinétique chimique :.....	34
2.4.3	Taux de production des espèces chimiques : .....	36
2.4.4	Modélisation du déséquilibre vibrationnel.....	38
2.5	Couplage « Chimie-Vibration » .....	44
2.5.1	Influence de la vibration sur la dissociation (CVD).....	44
2.5.2	Influence de la chimie sur la vibration : couplage CVDV .....	46
2.6	Conclusion.....	47
3	APPLICATION A UN ECOULEMENT MONODIMENSIONNEL A L'AVANT D'UNE ONDE DE CHOC DROITE.....	48
3.1	Introduction .....	49
3.2	Paramètres macroscopique sur le front du choc .....	51
3.3	Système d'équations différentielles.....	51
3.4	Fermeture du système :.....	52
3.5	Résolution numérique.....	53
3.5.1	Présentation de la méthode des différences finies.....	54
3.5.2	Maillage :.....	56
3.6	Aspect algorithmique.....	59
3.6.1	La première méthode :.....	59
3.6.2	La deuxième méthode .....	62
3.6.3	Organigramme de la méthode .....	66
3.7	Présentation du programme .....	68
3.8	Conclusion.....	70
4	SIMULATION NUMERIQUE D'UN ECOULEMENT HYPERSONIQUE BIDIMENSIONNEL VISQUEUX EN DESEQUILIBRE CHIMIQUE .....	71
4.1	Introduction .....	72
4.2	Modélisation de Turbulence .....	73
4.2.1	Ecoulement turbulent .....	73
4.2.2	Les modèles de turbulence .....	73
4.3	Problème et Outils .....	76
4.3.1	Description de problème .....	76
4.3.2	Le logiciel ANSYS Workbench.....	76

4.3.3	Création d'un système d'analyse « Fluid Flow ».....	77
4.4	Création de la géométrie.....	78
4.4.1	ANSYS DesignModeler.....	78
4.4.2	Dessin « Sketch » et création du domaine de calcul .....	79
4.5	Maillage de domaine .....	80
4.5.1	Maillage.....	80
4.5.2	Génération du maillage .....	81
4.5.3	Repérage des conditions aux limites .....	82
4.6	Mise en données et simulation.....	83
4.6.1	Présentation de Fluent .....	83
4.6.2	Chargement et vérification de Maillage .....	85
4.6.3	Choix du solveur .....	85
4.6.4	Choix du modèle de turbulence.....	87
4.6.5	Création de mélange « Propriétés de transport et réactions » .....	88
4.6.6	Les conditions aux limites.....	90
4.6.7	Initialisation.....	90
4.6.8	Convergence.....	91
4.7	Conclusion .....	93
5	RESULTATS ET COMMENTAIRES .....	94
5.1	Introduction .....	95
5.2	Résultats de l'étude 1-D .....	95
5.2.1	Evolution de la température le long de la plage de relaxation .....	95
5.2.2	Evolution des fractions massiques des espèces le long de la plage de relaxation... 96	
5.2.3	Evolution de la vitesse, la masse volumique et la pression.....	96
5.2.4	L'effet de couplage chimie-vibration.....	97
5.3	Résultats de l'étude 2D.....	105
5.3.1	Sphère de Lobb.....	105
5.3.2	Double Ellipse : .....	118
5.4	Conclusion.....	128
	CONCLUSION.....	129
	APPENDICE.....	132
	Explication Du Calcul De $\omega_c, s$ .....	132
	Les Coefficients Des Constantes De Vitesse Directes Et Les Constantes D'équilibre.....	135

Les Constantes Et Proprietes Thermodynamiques.....	137
BIBLIOGRAPHIE .....	139
ARTICLE PUBLIE.....	

## NOMENCLATURE

$a$	: Vitesse du son ( $\text{m.s}^{-1}$ ).
$[A_s]$	: Concentration molaire de l'espèce $s$ ( $\text{mol.m}^{-3}$ ).
$CVD$	: Couplage vibration-dissociation.
$CVDV$	: Couplage vibration-dissociation-vibration.
$C_p$	: Chaleur massique à pression constante ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_v$	: Chaleur massique à volume constant ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{ps}$	: Chaleur massique à pression constante de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{vs}$	: Chaleur massique à volume constant de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{ps}$	: Chaleur massique à pression constante de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{v,s}^{(rot)}$	: Chaleur massique à volume constant de rotation de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{v,s}^{(tr)}$	: Chaleur massique à volume constant de translation de $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$C_{v,s}^{(v)}$	: Chaleur massique à volume constant de vibration de $s$ . ( $\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ).
$\bar{c}_s$	: Vitesse moléculaire moyenne de l'espèce $s$ ( $\text{m.s}^{-1}$ ).
$d$	: Diamètre d'une particule (m).
$Da$	: Nombre de Dàmkohler.
$D_s$	: Coefficient de diffusion de l'espèce $s$ .
$\widehat{D}_s$	: Energie de vibration moyenne par unité de masse de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e$	: Energie interne massique ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$E$	: Energie totale massique ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e_{el,s}$	: Energie électronique massique de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e_{tr,s}$	: Energie de translation massique de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e_v$	: Energie de vibration ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e_{v,s}$	: Energie de vibration de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$e_{v,s}^*$	: Energie de vibration à l'équilibre de l'espèce $s$ ( $\text{J.kg}^{-1}$ ).
$g_j$	: la dégénérescence.
$G_k$	: Génération de l'énergie cinétique turbulente.
$G_\omega$	: Génération de la dissipation effective.

$h$	: Constante de PLANCK, $h = 6,6260688 \times 10^{-34}$ (J.s <sup>-1</sup> )
$h$	: Enthalpie massique (J.kg <sup>-1</sup> ).
$h_{f,s}^{\circ}$	: Enthalpie de formation massique de l'espèce $s$ (J.kg <sup>-1</sup> ).
$H$	: Enthalpie massique totale (J.kg <sup>-1</sup> ).
$I$	: Moment d'inertie de la particule.
$k$	: Energie cinétique turbulente (J.kg <sup>-1</sup> ).
$k_B$	: Constante de BOLTZMANN, $k_B = 1.3802 \times 10^{-23}$ (J.K <sup>-1</sup> ).
$k_{d,r}$	: Constante de vitesse directe de la réaction $r$ (m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> ).
$k_{eq,r}$	: Constante d'équilibre de la réaction $r$ .
$k_{i,r}$	: Constante de vitesse inverse de la réaction $r$ . (m <sup>6</sup> .mol <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ).
$K_n$	: Nombre de Knudsen.
$l$	: Le libre parcours moyen (m).
$L_0$	: Longueur caractéristique de l'obstacle (m).
$m_s$	: Masse d'une particule (kg/particule).
$M$	: Nombre de Mach.
$\widehat{M}$	: Masse molaire du mélange (kg.mol <sup>-1</sup> ).
$M_s$	: Masse molaire de l'espèce $s$ (kg.mol <sup>-1</sup> ).
$n_s$	: Nombre de moles de l'espèce $s$ .
$N$	: Nombre de particules.
$N_A$	: Nombre d'AVOGADRO, $N_A = 6.023 \times 10^{23}$ (mol <sup>-1</sup> ).
$N_s$	: Densité numérique de l'espèce $s$ (m <sup>-3</sup> ).
$N_j$	: Nombre de particule à un niveau énergétique $j$ .
$p$	: Pression du mélange (N.m <sup>-2</sup> ).
$p_s$	: Pression du mélange (N.m <sup>-2</sup> ).
$Q$	: Fonction de partition.
$Q_{rot,s}$	: Fonction de partition de rotation.
$Q_{tr,s}$	: Fonction de partition de translation.
$Q_{v,s}$	: Fonction de partition de vibration.
$R$	: Constante universelle des gaz parfaits (8.314 J.mol <sup>-1</sup> .K).
$r$	: Constante du mélange gazeux (J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ).



$R_e$	: Nombre de Reynolds.
$r_s$	: Constante de l'espèce gazeuse $s$ ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ ).
$T$	: Température translationnelle (K).
$T_a$	: Température fictive 'moyenne' (K).
$T_{ch}$	: Température translationnelle de la molécule juste après le choc (K).
$T_{v,s}$	: Température de vibration de l'espèce $s$ (K).
$T_{vs,ch}$	: Température vibrationnelle de la molécule juste après le choc (K).
$t$	: Temps (s).
$u$	: Composante de la vitesse d'écoulement suivant l'axe $x$ ( $m.s^{-1}$ ).
$u_j$	: Vecteur de vitesse, $j = 1, 2, 3$ ( $m.s^{-1}$ )
$v$	: Composante de la vitesse d'écoulement suivant l'axe $y$ ( $m.s^{-1}$ ).
$V$	: Volume ( $m^3$ ).
$V(T, T_v)$	: Facteur de couplage.
VE	: Echanges vibration-électron.
VR	: Echanges vibration-rotation.
VT	: Echanges vibration-translation.
VV	: Echanges vibration-vibration
$x_j$	: Vecteur position $j = 1, 2, 3$ (m).
$\alpha$	: Angle d'incidence.
$\gamma$	: Rapport des chaleurs spécifiques.
$\gamma_{s,r}$	: Efficacité de l'élément-tiers.
$\Gamma$	: Effet net des éléments-tiers.
$\Gamma_k$	: Diffusivité effective de l'énergie cinétique turbulente.
$\Gamma_\omega$	: Diffusivité effective de la dissipation spécifique.
$\delta$	: Distance de détachement de l'onde de choc normale (m).
$\delta_{i,j}$	: Symbole de Kronecker.
$\varepsilon$	: Dissipation de l'énergie cinétique turbulente ( $m^2.s^{-3}$ ).
$\varepsilon_j$	: Energie correspondante au niveau $j$ .
$\eta$	: Conductivité thermique de l'énergie translation-rotation ( $J.m^{-1}.s^{-1}$ ).
$\eta_e$	: Conductivité thermique de l'énergie électronique ( $J.m^{-1}.s^{-1}$ ).
$\eta_v$	: Conductivité thermique de l'énergie de vibration ( $J.m^{-1}.s^{-1}$ ).

$\theta_{d,r}$	: Température de dissociation (K).
$\theta_{rot,s}$	: Température caractéristique de rotation de l'espèce $s$ (K).
$\theta_{v,s}$	: Température caractéristique de vibration de l'espèce $s$ (K).
$\Lambda$	: Coefficient de symétrie.
$\mu$	: Viscosité dynamique ( $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ).
$\mu_{s,s'}$	: Masse réduite de la molécule $s$ et $s'$ ( $\text{kg.mol}^{-1}$ ).
$\mu_t$	: Viscosité dynamique turbulente ( $\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ).
$\nu'_{s,r}$ et $\nu''_{s,r}$	: Coefficient stœchiométriques correspondant à la réaction $r$ et l'espèce $s$ .
$\xi_s$	: Fraction molaire de l'espèce $s$ .
$\rho$	: Masse volumique du mélange ( $\text{kg.m}^{-3}$ ).
$\rho_s$	: Masse volumique de l'espèce $s$ ( $\text{kg.m}^{-3}$ ).
$\sigma_v$	: Section efficace de collision ( $\text{m}^2$ ).
$\tau_{coll}$	: Temps caractéristique de collision (s).
$\tau_s^{MW}$	: Temps de relaxation calculé par MILLIKAN & WHITE (s).
$\tau_{écoul}$	: Temps caractéristique de l'écoulement (s).
$\tau_s^{VT}$	: Temps caractéristique de la relaxation vibratoire de l'espèce $s$ (s).
$\tau_{s,s'}$	: Temps caractéristique de vibration de l'espèce $s$ (s).
$\nu$	: Fréquence de vibration ( $\text{s}^{-1}$ ).
$\omega$	: Taux de dissipation spécifique.
$\omega_{c,s}$	: Terme de production chimique de l'espèce $s$ ( $\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ).
$\omega_s^{VE}$	: Terme de production vibratoire correspond aux échanges VE ( $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ).
$\omega_s^{VT}$	: Terme de production vibratoire correspond aux échanges VT ( $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ).
$\omega_s^{VV}$	: Terme de production vibratoire correspond aux échanges VV ( $\text{J.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$ ).
$\Omega_\mu$	: L'intégrale réduite de collision.

#### Les indices

(1)	: Représente l'état du milieu avant le choc.
(2)	: Représente l'état du milieu après le choc.
$d$ et $i$	: Se rapportent à la dissociation (directe) et à la recombinaison (inverse).
$r$	: Numéro de la réaction.

*s* : Espèce chimique.

### Les exposants

(*rot*) : Rotation.

(*tr*) : Translation.

(*v*) : Vibration.

## LISTE DES FIGURES

Figure 1.1 : Rentrée de la Capsule dans l'atmosphère de la terre [26].....	7
Figure 1.2 : Régimes rencontrés lors d'une phase de rentrée atmosphérique terrestre [31] .....	8
Figure 1.3 : Onde de choc normale [17].....	13
Figure 1.5 : Visualisation de l'écoulement autour d'un corps émoussé [31]. .....	17
Figure 1.5 : Effet du gaz réel sur la température derrière une onde de choc normale.....	18
Figure 2.1 : Les différents modes d'énergie : (a) : énergie de translation, (b) : énergie de rotation, (c) : énergie de vibration, et (d) : énergie électronique. ....	28
Figure 3.1: Choc droit et volume de contrôle.....	49
Figure 3.2 : illustration des trois schémas de différences finies pour l'approximation de la dérivée d'une fonction.....	55
Figure 3.3 : Maillage du domaine de calcul. ....	56
Figure 3.4 : La fenêtre principale du programme de calcul.....	69
Figure 3.5 : Fenêtre pour spécifier le modèle de la cinétique chimique.....	69
Figure 3.6 : Fenêtre pour l'établissement de la connexion à la base de données.....	70
Figure 4.1 : Création de la simulation sous Workbench.....	78
Figure 4.2 : Dimensionnement de la géométrie et le domaine. ....	79
Figure 4.3 : La géométrie finale .....	80
Figure 4.4 : (a) : Maillage initial, (b) agrandissement au voisinage de la sphère.....	82
Figure 4.5 : Repérage des conditions aux limites.....	83
Figure 4.6 : Organigramme du solveur « density based » [2]. ....	87
Figure 4.7 : Les résidus. ....	92
Figure 5.1 : Évolution des températures de trans-rotation et vibration de $O_2$ , $N_2$ et $NO$ pour un nombre de Mach amont $M = 16.3$ .....	98
Figure 5.2 : Évolution des températures de trans-rotation et vibration de $O_2$ , $N_2$ et $NO$ pour un nombre de Mach amont $M = 19$ .....	98
Figure 5.3 : Évolution des fractions molaire des espèces pour un nombre de Mach amont $M = 16.3$ .....	99
Figure 5.4 : Évolution des fractions molaire des espèces pour un nombre de Mach amont $M = 19$ .....	99
Figure 5.5 : Évolution de la vitesse pour un nombre de Mach amont $M = 16.3$ .....	100
Figure 5.6 : Évolution de la vitesse pour un nombre de Mach amont $M = 19$ .....	100
Figure 5.7 : Évolution de la masse volumique pour un nombre de Mach amont $M = 16.3$ ..	101
Figure 5.8 : Évolution de la masse volumique pour un nombre de Mach amont $M = 19$ .....	101
Figure 5.9 : Évolution de la pression pour un nombre de Mach amont $M = 16.3$ .....	102
Figure 5.10 : Évolution de la pression pour un nombre de Mach amont $M = 19$ .....	102
Figure 5.11 : Comparaison de la température de trans-rotation sans et avec couplage de Park ( $q = 0.7$ ) à $M = 16.3$ .....	103
Figure 5.12 : Comparaison de la température de vibration de $O_2$ sans et avec couplage de Park $M = 16.3$ .....	103

Figure 5.13 : Comparaison de la température de vibration de $N_2$ sans et avec couplage de Park à $M = 16.3$ .....	104
Figure 5.14 : Comparaison de la température de vibration de $NO$ sans et avec couplage de Park à $M = 16.3$ .....	104
Figure 5.15 : Evolution des fractions massiques avec couplage de Park. ....	105
Figure 5.16 : (a) : Maillage adapté 4, (b) : agrandissement au voisinage du corps. ....	110
Figure 5.17 : La température le long de la ligne d'arrêt pour chaque maillage. ....	110
Figure 5.18 : La température le long de la ligne d'arrêt pour chaque modèle de turbulence, cas laminaire et le résultat de Tristan [31]. ....	111
Figure 5.19 : Comparaison de distance de détachement du choc pour les deux modèles de turbulence et l'expérience. ....	111
Figure 5.20 : Profil de $y^+$ du modèle $k - \omega$ .....	112
Figure 5.21 : Nombre de Mach autour de la sphère. ....	112
Figure 5.22 : Champ de température autour de la sphère. ....	113
Figure 5.23 : Champs de pression autour de la sphère. ....	113
Figure 5.24 : Champ de pression le long de la plage de relaxation "Tristan [31]" .....	114
Figure 5.25 : Température le long de la ligne d'arrêt. ....	114
Figure 5.26 : Les fractions massiques des espèces le long de la ligne d'arrêt. ....	115
Figure 5.27 : Fraction massique de $O_2$ autour de la sphère. ....	115
Figure 5.28 : Fraction massique de $N_2$ autour de la sphère. ....	116
Figure 5.29 : Fraction massique de $NO$ autour de la sphère. ....	116
Figure 5.30 : Fraction massique de $O$ autour de la sphère. ....	117
Figure 5.31 : Fraction massique de $N$ autour de la sphère. ....	117
Figure 5.32 : Maillage initial « double ellipse » $50 \times 220$ mailles. ....	121
Figure 5.33 : Maillage adapté « double ellipse » 160370 mailles. ....	121
Figure 5.34 : Nombre de Mach atour la double ellipse. ....	122
Figure 5.35 : La pression autour de la double ellipse. ....	122
Figure 5.36 : coefficient de pression autour de la double ellipse. ....	123
Figure 5.37 : Coefficient de pression autour de la double ellipse « Gökçen [10] » .....	123
Figure 5.38 : Profil de coefficient de pression sur la paroi. ....	124
Figure 5.39 : Evolution de la température autour de la double ellipse. ....	124
Figure 5.40 : Evolution de la température autour de la double ellipse « Gökçen [10] ». ....	125
Figure 5.41 : La fraction massique de $O_2$ autour de la double ellipse. ....	125
Figure 5.42 : La fraction massique de $N_2$ autour de la double ellipse. ....	126
Figure 5.43 : La fraction massique de $NO$ autour de la double ellipse. ....	126
Figure 5.44 : La fraction massique de $O$ autour de la double ellipse. ....	127
Figure 5.45 : La fraction massique de $N$ autour de la double ellipse. ....	127



## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1: Ordre de nombre de collisions nécessaire pour l'équilibre des les degrés de libertés et la dissociation : [11].....	24
Tableau 2: Réactions de dissociation ( $r=1$ à 15) et d'échange ( $r=16$ à 17).....	35
Tableau 3.1 : Caractéristiques des six points typiques de la trajectoire de rentrée estimée de la navette Hermès.....	50
Tableau 4.1 : Les logiciels utilisés dans le projet "Fluid Flow".....	78
Tableau 4.2 : Repérage des conditions aux limites.....	83
Tableau 5.1 : Nombre de nœud et maille de chaque maillage utilisé.....	106
Tableau B.1 : coefficients de la constante de vitesse directe .....	135
Tableau B.2 : Coefficients des constantes de vitesse directe.....	136
Tableau B.3 : Coefficients des constantes d'équilibre .....	136
Tableau C.1 : Masses molaires, enthalpies de formation et températures caractéristiques de vibration .....	137
Tableau C.2 : Les coefficients des polynômes de $C_p$ .....	137
Tableau C.3 : Efficacité de l'élément-tiers .....	138
Tableau C.4 : Les paramètres de Lennard-Jones .....	138

# INTRODUCTION

### INTRODUCTION

Le développement des techniques aérospatiales a suscité tout récemment un regain d'intérêt pour les recherches liées aux écoulements de fluide à grande vitesse. Les phénomènes aérodynamiques associés conduisent à des températures très élevées, en particulier sur le nez de l'engin, conduisant à le protéger par un bouclier thermique où le nombre de Mach doit être très supérieur à l'unité. Vu la complexité des phénomènes qu'on rencontre dans la phase de la rentrée atmosphérique dont l'écoulement autour des véhicules spatiaux au cours de cette phase peut être le siège de tels phénomènes, les écoulements hypersoniques sont à l'heure actuelle l'objet d'études intensives. Dans ces conditions, pour le calcul de l'énergie interne, il faut tenir compte de tous les modes d'énergies. Du fait des vitesses atteintes et de l'altitude, la densité du fluide est généralement faible et il en résulte que les temps caractéristiques de ces processus physico-chimiques peuvent être du même ordre de grandeur que le temps caractéristique de l'écoulement ou temps de transit des molécules, l'écoulement peut être en déséquilibre thermo-chimique.

Pour étudier la phase de la rentrée atmosphérique d'une navette spatiale, il est nécessaire de comprendre correctement les processus de déséquilibre thermo-chimique couplés avec les phénomènes aérodynamiques de cette phase. On a constaté, rapidement, que l'aérodynamique hypersonique est différente de l'aérodynamique supersonique classique. L'étude des écoulements hypersoniques implique non seulement la connaissance de l'aérodynamique, mais aussi de la thermodynamique chimique à haute température, suivant VAN KARMAN, ce domaine appartient à l'Aérothermochimie.

Il apparaît, dans ce type d'écoulement, un certain nombre de phénomènes qui restaient négligeables en régimes supersoniques, mais qui deviennent très prépondérants en régimes hypersoniques. En effet, l'effet de l'onde de choc normal devient très considérable sur la composition chimique du fluide, tel que le déclenchement du processus de dissociation des molécules, la formation de nouvelles espèces, l'ionisation des particules à cause des grandes températures qui règnent à l'aval de l'onde de choc. Particulièrement, dans la couche de choc ou la zone entre le choc et la surface du corps qui est le siège des transferts énergétiques importants et notamment un transfert d'énergie cinétique en énergie thermique favorisant de

nombreux phénomènes physico-chimiques complexes, La température locale peut atteindre plusieurs dizaines de milliers de degrés, cette augmentation se manifeste, tout d'abord, sous forme d'une augmentation de l'énergie de l'agitation thermique de la translation et de la rotation des molécules, ensuite une évolution vers l'état d'équilibre s'effectuera grâce aux collisions entre particules. Une zone de relaxation vers l'équilibre final apparaîtra donc en aval du choc intense, dans laquelle une partie de l'énergie de translation et de rotation est cédée aux modes internes ou absorbée par des réactions chimiques qui vont modifier la composition chimique du mélange gazeux.

L'énergie des atomes est répartie entre les modes de translation et électronique, à ces deux modes, s'ajoutent pour les molécules les modes de rotation et de vibration. Pour qu'un mode énergétique d'une espèce retrouve l'équilibre, il faut qu'un certain nombre de collisions particulières se produisent pour assurer des échanges énergétiques suffisants. Pour les modes de translation et de rotation, l'équilibre étant atteint après quelques collisions seulement. En fait, les énergies de translation et de rotation des différents composants sont équilibrées à une température commune, immédiatement en aval du choc. L'excitation en vibration, celle des niveaux électroniques ainsi que les modifications de la composition résultant de réactions chimiques ne seront complètement accomplies qu'après des milliers de collisions, de sorte que ces processus induisent une zone de relaxation relativement étendue en aval de l'onde de choc. Le temps nécessaire pour atteindre l'équilibre est du même ordre de grandeur que le temps d'écoulement. A travers le choc, l'écoulement reste figé, c'est-à-dire que la composition chimique du mélange d'air, composé principalement de l'azote moléculaire et l'oxygène moléculaire, n'est pas affectée, puis suite à l'augmentation de la température, le mélange va se retrouver, en aval du choc, en déséquilibre vibrationnel et en déséquilibre chimique. Les molécules vont commencer à vibrer et après un seuil, les liaisons des molécules vont se rompre et libérer des atomes. Si la température est suffisamment grande, des électrons vont pouvoir se libérer des orbites périphériques des particules et se mouvoir dans le mélange.

L'étude de la zone de relaxation requiert, dans un premier temps, la détermination des paramètres de l'écoulement à l'entrée de cette zone, c'est-à-dire immédiatement en aval du choc. En vertu de l'hypothèse que les énergies de vibration, l'excitation électronique et la composition chimique y sont identiques à ce qu'elles étaient en amont du choc, les relations de RANKINE-HUGONIOT, exprimant la conservation de la masse, de la quantité de

mouvement et de l'énergie entre l'amont et l'aval du choc, sont applicables et fourniront les conditions initiales pour le calcul de l'écoulement dans la zone de relaxation.

Les équations décrivant la structure de la zone de relaxation sont les équations cinétiques de l'excitation vibrationnelle des différents composants chimiques ainsi que les équations cinétiques pour la dissociation et les autres réactions chimiques. Ce système est évidemment complété par les équations classiques fondamentales de la mécanique des fluides, c.à.d. Les équations de la conservation de masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

Une particularité importante, qui caractérise un écoulement de mélange gazeux réactif en régime hypersonique, est que les phénomènes de relaxation vibrationnelle et chimique sont fortement couplés l'un à l'autre de telle manière que le déséquilibre vibrationnel, qui existe à l'aval du choc intense, influence grandement la dissociation chimique. Une molécule excitée vibrationnellement se dissocie plus facilement, c'est le couplage vibration-dissociation (CVD). Les phénomènes chimiques à leurs tour ont une influence sur la vibration des molécules, on parle alors de couplage vibration-dissociation-vibration (CVDV). En effet, le processus de dissociation chimique entraîne une diminution de l'énergie de vibration moyenne des molécules car ce sont les molécules les plus excitées vibrationnellement qui se dissocient le plus facilement. Tous ces phénomènes ont un effet important sur les grandeurs aérothermodynamiques, leur compréhension est donc essentielle à l'échelle des écoulements hypersoniques.

Dans ce mémoire, une étude des phénomènes de déséquilibre thermochimique dans la couche de choc a été envisagée. Dans cette étude, le fluide étant de l'air où il a été assimilé, dans la couche de choc, à un mélange de gaz réactif, constitué de 5 espèces réagissant entre elles suivant le modèle de Zeldovich à 17 réactions élémentaires et dans lequel se propage une onde de choc intense.

Dans un premier temps, une description des écoulements de rentrées hypersoniques et caractérisations des écoulements sont présentées brièvement dans le premier chapitre. Une partie de ce chapitre a été consacré à l'établissement des relations de RANKINE-HUGONIOT permettant de lier les paramètres de l'écoulement en amont aux celles en aval d'une onde de choc droite.

Dans le deuxième chapitre, on a fait une modélisation mathématique et physique d'un écoulement du mélange de gaz réactif en déséquilibre thermochimique. Tout d'abord, les



équations de conservation qui régissent un tel écoulement sont présentées. Ensuite, on a rappelé les différents modèles d'interaction et les fonctions de partitions en vue de la détermination des caractéristiques globales du mélange réactif à partir des propriétés thermodynamiques des composants individuels par une description statistique. En outre, le modèle de la cinétique chimique à 17 réactions élémentaires est présenté pour modéliser le déséquilibre chimique. Pour modéliser le déséquilibre vibrationnel, on a attaché une importance particulière à l'expression du terme source vibrationnel en explicitant de façon détaillée l'expression du temps de relaxation de vibration. Finalement et afin d'explicitier l'influence de la chimie sur la vibration ou vice-versa, on a présenté brièvement le couplage chimie-vibration par ses deux types principaux ; non-préférentiel (CVD) et préférentiel (CVDV).

Après établissement du modèle mathématique et physique d'un écoulement en déséquilibre thermo-chimique, on a proposé, dans le troisième chapitre, d'étudier l'écoulement en aval d'une onde de choc droite afin d'évaluer l'influence des différents processus pris en compte dans le modèle établi.

Les équations modélisant l'écoulement sont résolues simultanément avec les équations de relaxations des phénomènes physico-chimiques (excitation vibrationnelle, relaxation chimique). Concernant la résolution numérique, on a adopté la méthode des différences finies permettant de discrétiser le domaine de calcul (couche de choc), par la suite deux approches sont suivies pour résoudre le système d'équations algébriques non linéaire obtenu après discrétisation du domaine par la méthode des différences finies ; il s'agit de la substitution successive et la méthode de Newton appliquée aux systèmes. Un programme Fortran est réalisé et géré à l'aide d'un autre programme interactif réalisé par le langage Visual Basic, pour bénéficier, à la fois, des hautes performances de calcul qu'offre le langage Fortran et la simplicité de la manipulation grâce aux interfaces graphiques que dispose le dernier langage. Les résultats obtenus sont présentés dans le chapitre 5.

Pour pousser en plus le travail, on a proposé dans le quatrième chapitre d'étudier un écoulement hypersonique bidimensionnel visqueux en déséquilibre chimique autour des corps émoussés avec la prise en compte des modèles de turbulence. En particulier, ce chapitre porte sur la faisabilité d'utilisation d'un code de calcul numérique de la dynamique des fluides pour simuler un tel écoulement autour d'un corps émoussé. Dans cette contribution on a focalisé sur le comportement de l'écoulement réactif et les phénomènes physico-chimiques qui

prennent naissance en aval de l'onde de choc intense qui apparaît en amont de l'obstacle, ainsi localiser l'onde de choc et étudier la couche de choc pour déterminer les champs de pression, de température et l'évolution des fractions massiques des espèces autour de l'obstacle. Le modèle mathématique est basé sur la résolution des équations de Navier Stokes pour un mélange gazeux réactif. Le logiciel ANSYS Fluent 14.5 est utilisé pour réaliser cette partie de travail. Concernant les corps étudiés, on a considéré la sphère de Lobb et la double ellipse modélisant le nez de la navette spatiale « Hermès ». Les résultats obtenus sont présentés dans le cinquième chapitre et ont été comparés avec ceux de la littérature scientifique où ils présentent une bonne concordance.

Le dernier chapitre est consacré à la présentation des résultats des différentes études envisagées, c'est-à-dire, l'étude 1-D faite dans le troisième chapitre et celle faite dans le quatrième chapitre.

Enfin, une conclusion générale sera tirée et quelques perspectives ultérieures seront présentées.

# **CHAPITRE 1**

## **Caractérisation et description des écoulements de rentrées hypersoniques**

## 1.1 Introduction

Lorsqu'un véhicule spatial rentre dans les couches supérieures de l'atmosphère, sa vitesse est encore très importante (vitesses hypersoniques), la vitesse est de l'ordre de plusieurs dizaines de fois la vitesse du son. L'écoulement est alors qualifié d'hypersonique. Les phénomènes aérodynamiques associés entraînent des températures très élevées, en particulier sur le nez de l'engin. Vu la complexité des phénomènes rencontrés dans les écoulements hypersoniques qui sont à l'heure actuelle l'objet d'études intensives. Nous présentons dans ce qui suit quelques particularités qui caractérisent le régime hypersonique.

La figure (1.1) suivante montre une capsule à la phase de sa rentrée dans l'atmosphère [14].

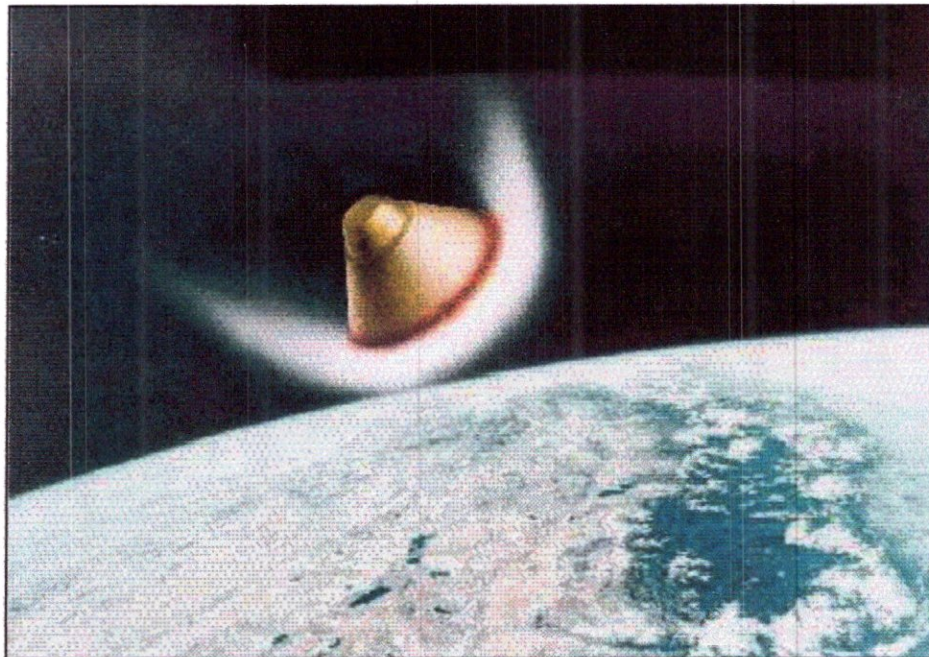


Figure 1.1 : Rentrée d'une capsule dans l'atmosphère de la terre [14].

## 1.2 Caractérisation des écoulements

Au cours d'une phase de rentrée, un véhicule rencontre différents régimes d'écoulements, de l'hypersonique au subsonique, du régime laminaire au régime turbulent, du milieu raréfié au milieu continu (figure 1.2). Un écoulement se définit par le régime de vitesse, le comportement dynamique et le régime d'écoulement.

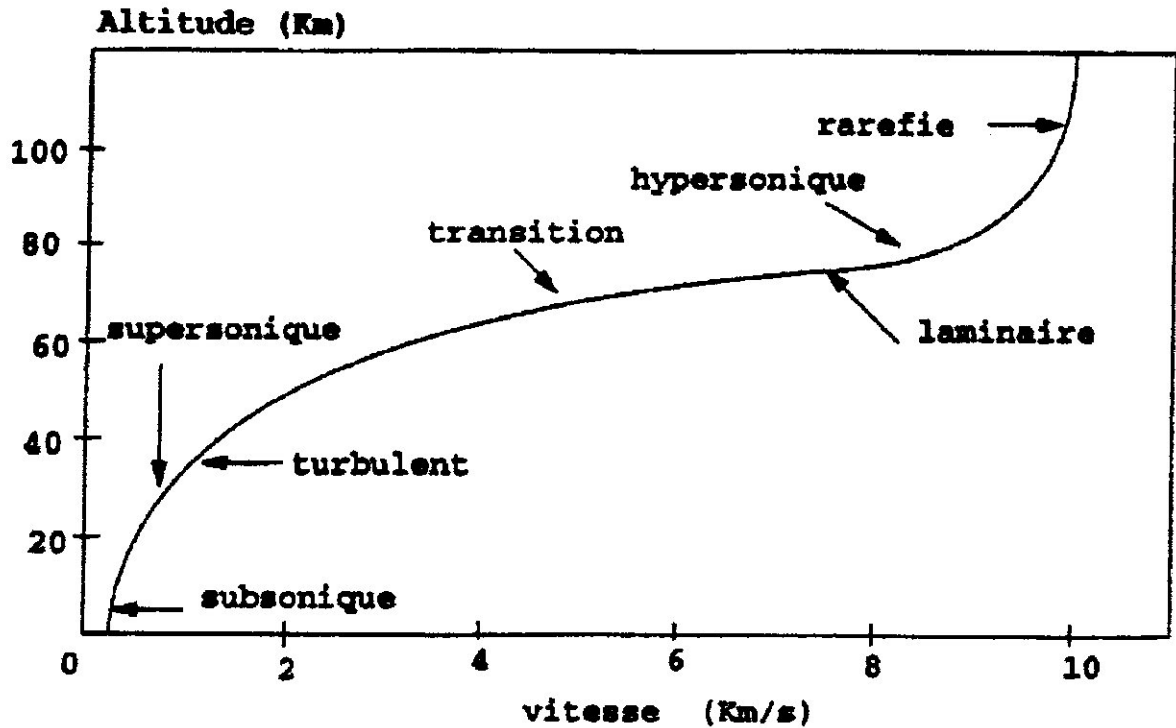


Figure 1.2 : Régimes rencontrés lors d'une phase de rentrée atmosphérique terrestre [20]

### 1.2.1 Le régime de vitesse :

Il est caractérisé par le nombre de Mach  $M$ , défini localement par le rapport entre la vitesse locale de l'écoulement  $u$  et la vitesse locale du son  $a$  :

$$M = \frac{u}{a} \quad (1-1)$$

Le nombre de Mach est le rapport de l'énergie cinétique d'une particule à son énergie interne [20]. On distingue quatre régimes de vitesse :

- Le régime subsonique,  $0 < M < 0.8$ : les lignes de courants du fluide épousent les contours de l'obstacle.

- Le régime transsonique,  $0.8 < M < 1.2$  : il s'agit d'un régime transitoire pour lequel l'écoulement présente localement, sur l'obstacle, des poches où le fluide atteint ou dépasse la vitesse locale du son.
- Le régime supersonique,  $1.2 < M < 7$  : un choc apparaît au nez de l'obstacle, au travers duquel des propriétés du fluide subissent des discontinuités, autrement dit, des variations brutales des propriétés sur une distance de l'ordre du libre parcours moyen des molécules.
- Le régime hypersonique,  $M > 7$  : apparition des phénomènes physico-chimiques, relaxation vibrationnelle, dissociation moléculaire, ionisation, rayonnement...etc., qui modifient l'écoulement de façon sensible.

### 1.2.2 Le comportement dynamique

Le comportement dynamique de l'écoulement est caractérisé par le nombre de Reynolds  $R_e$ , défini par :

$$R_e = \frac{\rho u L_0}{\mu} \quad (1-2)$$

Où  $\rho$  est la masse volumique du fluide,  $u$  sa vitesse,  $\mu$  sa viscosité dynamique et  $L_0$  est une longueur caractéristique de l'obstacle. Le nombre de Reynolds est le rapport des forces d'inertie aux forces de frottement. On distingue trois régimes de comportement dynamique des particules :

- Le régime laminaire,  $R_e < 10^5$ , pour lequel les filets fluides glissent les uns sur les autres.
- Le régime transitoire, qui marque le début de turbulence.
- Le régime turbulent, à des nombres de Reynolds plus grands, pour lesquels apparaissent des phénomènes à caractère non linéaire, non périodique et irrégulier dans l'espace et le temps. La turbulence favorise les transferts de chaleur, de masse et de quantité de mouvement [6].

### 1.2.3 Le régime d'écoulement

Le régime de l'écoulement est caractérisé par le nombre de Knudsen  $K_n$ , défini par :

$$K_n = \frac{l}{L_0} \quad (1-3)$$



Où  $L_0$  est une longueur caractéristique de l'obstacle et  $l$  est le libre parcours moyen. Le libre parcours moyen représente statistiquement la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions. Son expression dépend du modèle d'interaction moléculaire. Dans le modèle des sphères rigides, il peut se définir par la relation [11] :

$$l = \frac{m}{\sqrt{2}\pi d^2 \rho} \quad (1-4)$$

Où  $m$  est la masse d'une particule et  $d$  son diamètre. Pour une longueur de référence  $L_0$  de 1 m et dans le cadre d'une rentrée en atmosphère terrestre, on distingue trois régimes :

- Le régime raréfié,  $K_n \geq 0.1$  : Ce régime se rencontre pour des altitudes élevées, supérieures à 100 km, où la pression et la masse volumique du fluide sont très faibles. Il est alors nécessaire d'adopter une approche microscopique pour décrire l'évolution du fluide (équations de BOLTZMANN).
- Le régime transitoire,  $10^{-3} \leq K_n \leq 0.1$ , pour une altitude comprise entre 80 km et 100 km.
- Le régime continu,  $K_n \leq 10^{-3}$  : ce régime se rencontre pour des altitudes inférieures à 80 km, où la pression et la masse volumique du fluide sont suffisamment élevées pour que les diverses grandeurs macroscopiques qui caractérisent le fluide soient parfaitement définies. La description de l'écoulement s'obtient par la résolution des équations de Navier-Stokes, qui sont à l'origine, basées sur l'hypothèse de la continuité du milieu. Donc, on admet que le volume, que nous désignerons « particule fluide », est assez grand pour contenir un très grand nombre de molécules et assez petit pour définir une valeur « locale » et un élément de volume infinitésimal permettant de justifier le calcul différentiel et intégral [5].

Désormais, et dans toute la suite du mémoire, on se place dans le cadre du régime hypersonique, continu.

La modélisation de ce type d'écoulement est complexe ; il faut tenir compte des effets de gaz réels et également des transferts radiatifs. La complexité vient principalement du fait que l'écoulement peut être en déséquilibre thermo-chimique. En effet, à la traversée de l'onde de choc qui se forme en amont du corps de rentrée, l'énergie cinétique de l'écoulement, qui est très importante, est transférée par collisions vers l'énergie interne des particules [4]. Les

collisions entre particules sont suffisamment intenses pour provoquer le déclenchement des réactions chimiques et/ou l'excitation des degrés de liberté des particules, c.à.d. les modes de rotation, vibration et électronique (les modes de rotation et de vibration ne concernent que les molécules). On distingue trois types de collisions dans de tels milieux :

- Les collisions élastiques, pour lesquelles l'énergie mise en jeu est uniquement celle liée aux modes de translation. Les particules échangent lors d'une collision une part de leur énergie cinétique (échanges translation-translation). Ces collisions contribuent à faire tendre le milieu vers un état d'équilibre translationnel. C'est le phénomène de relaxation translationnelle.
- Les collisions inélastiques, au cours desquelles les particules échangent de l'énergie faisant intervenir la translation mais aussi d'autres degrés de libertés ; rotationnels, vibrationnels et électroniques. On dénombre ainsi divers types d'échanges, les échanges vibration-translation (VT), vibration-vibration (VV), rotation-translation (RT)...etc. Ces échanges vont faire tendre le milieu vers un état d'équilibre thermodynamique local à la température  $T$ .
- Les collisions réactives, qui provoquent des réactions chimiques telles que la dissociation, l'ionisation et l'échange de charges des particules.

### 1.3 Echelles de temps caractéristiques

Pour déterminer le type d'écoulement auquel est soumis le véhicule lors de la rentrée atmosphérique, on doit attacher une grande importance à la densité de l'atmosphère qui va déterminer en partie la nature des phénomènes physico-chimiques. En effet, suivant la densité du milieu atmosphérique, il y aura plus au moins de collisions entre les particules, donc plus au moins d'échanges d'énergie, suivant l'explication présentée dans le paragraphe (1.2.3).

La première hypothèse faite est celle d'une atmosphère assez dense pour pouvoir considérer le fluide comme un milieu continu, on parle alors de régime collisionnel. On appelle  $\tau_{écoul} \approx \frac{L_0}{u}$  le temps caractéristique de l'écoulement, et  $\tau_{coll}$  le temps caractéristique des collisions élastiques entre molécules. Le nombre de Knudsen peut être, également, défini par :



$$K_n = \frac{\tau_{coll}}{\tau_{écoul}} \quad (1-5)$$

Lorsque ce nombre est très petit devant l'unité, le milieu est continu (paragraphe précédent).

### 1.3.1 Nombre de Dàmkohler

Ce sont les collisions de type inélastiques entre particules (atomes ou molécules) qui créent les transferts d'énergie entre les modes internes [19]. Soit  $\tau$  le temps caractéristique dû au mode interne. En définissant le nombre de Dàmkohler  $Da$  comme étant le rapport du temps caractéristique d'écoulement du fluide  $\tau_{écoul}$  sur  $\tau$  :

$$Da = \frac{\tau_{écoul}}{\tau} \quad (1-6)$$

Nous pouvons alors caractériser le comportement du mode interne considéré de cet écoulement. Nous aurons :

- $Da \gg 1$  : l'évolution du mode se fait à l'équilibre ; le temps caractéristique de mise en place de l'énergie du mode est très court devant la faible 'vitesse' du fluide. Le processus physique dû à ce mode interne s'opère instantanément à la température du mélange.
- $Da \ll 1$  : le mode interne est figé ; la grande vitesse de l'écoulement diminue le nombre de collisions inélastiques entre les particules. Le temps de relaxation du mode est très grand devant le temps caractéristique d'écoulement du fluide. C'est le cas opposé à la situation précédente ; le processus physique dû à ce mode interne n'a pas le temps de se mettre en place.
- $Da \cong 1$  : Le mode interne est en déséquilibre ; les temps caractéristiques ayant le même ordre de grandeur, ce dernier est bien sûr le plus complexe mais le plus intéressant à traiter. Il nous concerne directement puisqu'il se produit à chaque fois dans des écoulements hypersoniques.

## 1.4 Ondes de choc droites

On rencontre de très nombreux écoulements compressibles à grande vitesse qui présentent des variations extrêmement rapides des paramètres caractérisant l'écoulement sur

des distances très faibles, typiquement de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen des molécules. Il est bien clair que, dans cette configuration, les équations développées pour traiter les milieux continus perdent leur validité. Il est alors nécessaire, soit d'employer une autre modélisation soit de traiter ces phénomènes, que nous appellerons chocs, comme des

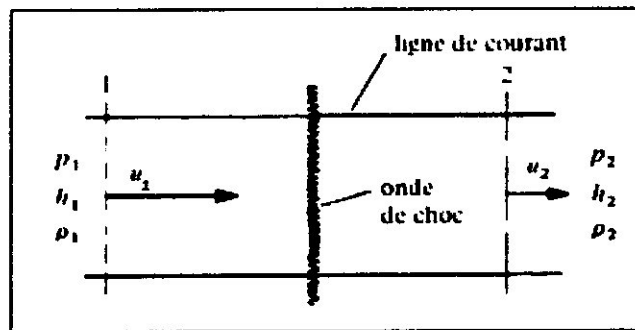


Figure 1.3 : Onde de choc normale [7].

discontinuités. C'est cette deuxième approche que nous utiliserons au cours de ce chapitre. Ainsi, en utilisant des équations de bilan au travers de ces discontinuités, nous pourrions établir un lien entre les propriétés de l'écoulement en amont et en aval de l'onde de choc, et relier ainsi les valeurs caractérisant ces deux zones à travers l'onde de choc qui, elle, modifie l'entropie des particules fluide.

#### 1.4.1 Relations de Rankine-Hugoniot

Les relations de Rankine-Hugoniot permettent d'établir le lien entre les deux états amont et aval d'une onde de choc dans un écoulement unidimensionnel. On considère l'onde de choc comme une surface de discontinuité perpendiculaire à l'écoulement, séparant une région amont (indice « 1 ») d'une région aval (indice « 2 »). Cette onde de choc est stationnaire, C'est-à-dire, est immobile par rapport au référentiel de l'étude.

En plus de ces hypothèses utilisées, on peut considérer également que :

- Toutes les lignes de courant sont parallèles entre elles et perpendiculaires à la surface du choc, l'écoulement unidimensionnel suivant la direction  $x$ .
- Il n'y a pas de réaction chimique, et le fluide reste en équilibre thermodynamique.

On va maintenant écrire les différentes équations de conservation, permettant de relier l'état (1) en amont du choc, à l'état (2) en aval du choc [1].

Pour la conservation de masse :

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (1-7)$$

Puisque le choc, perpendiculaire à l'écoulement, est infiniment mince et que la section reste donc constante ( $A_1 = A_2$ ).

Pour la quantité de mouvement, on a :

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2 \quad (1-8)$$

Le bilan d'énergie s'écrit :

$$h_1 + \frac{u_1^2}{2} = h_2 + \frac{u_2^2}{2} \quad (1-9)$$

En adjoignant à ces équations l'équation d'état du gaz, on obtient ainsi quatre équations, permettant, à partir de la connaissance de l'état (1), de calculer les quatre inconnues  $p_2$ ,  $\rho_2$ ,  $u_2$  et  $h_2$  qui caractérisent l'état (2). L'équation d'état admet plusieurs formes, parmi eux par exemple la forme  $\rho = \rho(s, p)$  où la masse volumique est une fonction de l'entropie et la pression. Pour un gaz parfait, l'équation d'état du gaz s'écrit simplement sous la forme suivante :

$$p = \rho r T \quad (1-10)$$

On va maintenant chercher à faire apparaître les nombres de Mach amont et aval pour obtenir des rapports simples, on a choisi pour l'équation d'énergie (1-9) :

$$C_p T_1 + \frac{u_1^2}{2} = C_p T_1 \left( 1 + \frac{u_1^2}{2C_p T_1} \right) = C_p T_1 \left( 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2 \right)$$

Puisque la vitesse du son  $a$  est donnée par  $a = \gamma r T_1$  et  $C_p = (\gamma r)/(\gamma - 1)$ . L'équation de bilan d'énergie se ramène ainsi à :

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma - 1}{2} M_2^2} \quad (1-11)$$

L'équation de bilan de quantité de mouvement peut être transformée en utilisant :

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_1 \left( 1 + \frac{\rho_1 u_1^2}{p_1} \right) = p_1 (1 + \gamma M_1^2)$$

On a donc la deuxième relation cherchée :

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{1 + \gamma M_1^2}{1 + \gamma M_2^2} \quad (1-12)$$

En utilisant l'équation d'état des gaz parfaits (1-10) . On peut en déduire immédiatement l'expression du rapport  $\rho_2/\rho_1$ .

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \left(\frac{p_2}{p_1}\right) \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{-1} \quad (1-13)$$

Il reste maintenant à relier les nombres de Mach amont et aval. Pour ce faire, on utilise le bilan de masse :

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{M_1 a_1}{M_2 a_2} = \frac{M_1}{M_2} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{-1/2} \quad (1-14)$$

En utilisant (1-13) et (1-14) et on remplaçant les rapports obtenus précédemment par leurs expressions, on obtient :

$$\frac{1 + \gamma M_1^2}{1 + \gamma M_2^2} = \frac{M_1}{M_2} \left( \frac{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_1^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_2^2} \right)^{1/2}$$

La résolution de cette équation du second degré de l'inconnue  $M_2^2$  donne, en écartant la solution triviale  $M_2^2 = M_1^2$ , l'expression de  $M_2^2$  :

$$M_2^2 = \frac{2 + (\gamma - 1)M_1^2}{2\gamma M_1^2 + 1 - \gamma} \quad (1-15)$$

En substituant cette expression dans les expressions précédentes. Elles ne deviennent fonctions que du nombre de Mach amont, on a alors :

$$\frac{T_2}{T_1} = \left( \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_1^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \right) \left( \frac{\gamma-1}{\gamma+1} + \frac{2}{(\gamma+1)M_1^2} \right) \quad (1-16)$$

De la même façon, on trouve :

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_1^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \quad (1-17)$$

Les expressions des autres rapports peuvent être trouvées de la même manière.

Si on trace le nombre de Mach  $M_2$  en aval du choc en fonction de  $M_1$ , on constate qu'il décroisse de façon monotone. Il est toujours inférieur à l'unité, ce qui permet de dire que l'onde de choc droite s'accompagne toujours d'une transition supersonique-subsonique.

Il faut noter aussi que le nombre de Mach amont  $M_1$  doit nécessairement être supérieur à l'unité pour qu'il puisse y avoir onde de choc. Les ondes de choc ne peuvent en aucun cas se former dans un écoulement subsonique. Les différentes relations obtenues précédemment sont également définies pour des nombres de Mach amont inférieurs à l'unité, ce qui est, dans un premier temps, contradictoire avec la condition d'apparition des ondes de choc. Pour enlever l'ambiguïté, il faut avoir recours au deuxième principe de la thermodynamique qui énonce que l'entropie d'un système ne peut pas décroître ( $\Delta s \geq 0$ ). La formule suivante explique bien la condition d'apparition de l'onde de choc [2] :

$$\Delta s = C_p \ln \frac{T_2}{T_1} - r \ln \frac{p_2}{p_1} \quad (1-18)$$

En substituant dans cette expression les expressions (1-18) et (1-17), on obtient l'expression, de la variation de l'entropie en fonction de  $M_1$ . On distingue trois cas tel que : si<sup>1</sup>  $M_1 = 1$ ,  $\Delta s = 0$ , et si  $M_1 > 1$ ,  $\Delta s > 0$ . Les deux sont en accord avec le deuxième principe de la thermodynamique. Mais, dans le cas où  $M_1 < 1$  on a  $\Delta s < 0$  qui est en contradiction avec le deuxième principe de la thermodynamique. Ceci confirme bien que la condition d'apparition d'une onde de choc est:  $M_1 \geq 1$ .

### 1.5 L'onde de choc détachée

Lorsqu'un corps de rentrée de forme émoussée (sonde, navette, capsule...) pénètre à grande vitesse dans une atmosphère planétaire, un choc fort et détaché se forme en amont du corps (figure 1.4), tandis qu'il est attaché dans le cas d'un corps tranchant [1]. Dans ce dernier cas, le corps déplaçant risque de s'endommager à cause des hautes températures qui règnent derrière les ondes de choc normales. Ceci, explique bien la forme émoussée adoptée pour les véhicules hypersoniques, évidemment le détachement de l'onde de choc induit une zone comprise entre l'aval du choc et la paroi du corps appelée « couche de choc ». Pour un gaz réel, les processus thermochimiques qui règnent dans la couche de choc, vont tendre le milieu vers un état d'équilibre thermodynamique [34]. La distance de détachement  $\delta$  de l'onde de choc du nez d'un corps émoussé, de rayon  $R$ , dépend principalement de la masse

<sup>1</sup> Si  $M_1 = 1$ , une onde de choc infiniment faible [10].

volumique du fluide et le rayon de nez du corps. Elle est calculée par la relation approximée suivante [1] :

$$\delta = \frac{R}{\rho_2/\rho_1} \quad (1-19)$$

Où  $\rho_1$  et  $\rho_2$  sont, respectivement, la masse volumique du fluide en amont du choc et juste derrière le choc.

### 1.5.1 Physique des gaz réels

A des températures très élevées atteintes en aval des ondes de choc, l'écoulement subit diverses transformations telles que l'excitation de l'énergie de vibration, la dissociation des molécules et l'ionisation des atomes formés.

Les phénomènes sont endothermiques de sorte que les températures sont très inférieures à celles calculées en cas d'un gaz parfait. A titre d'exemple, pour un mobile entrant dans l'atmosphère à une vitesse de 4 Km/s, l'air est porté à une température de 5000 K environ [14] , alors que, sans effet de gaz réel cette température est de 8000 K comme l'indique la figure )1.5).

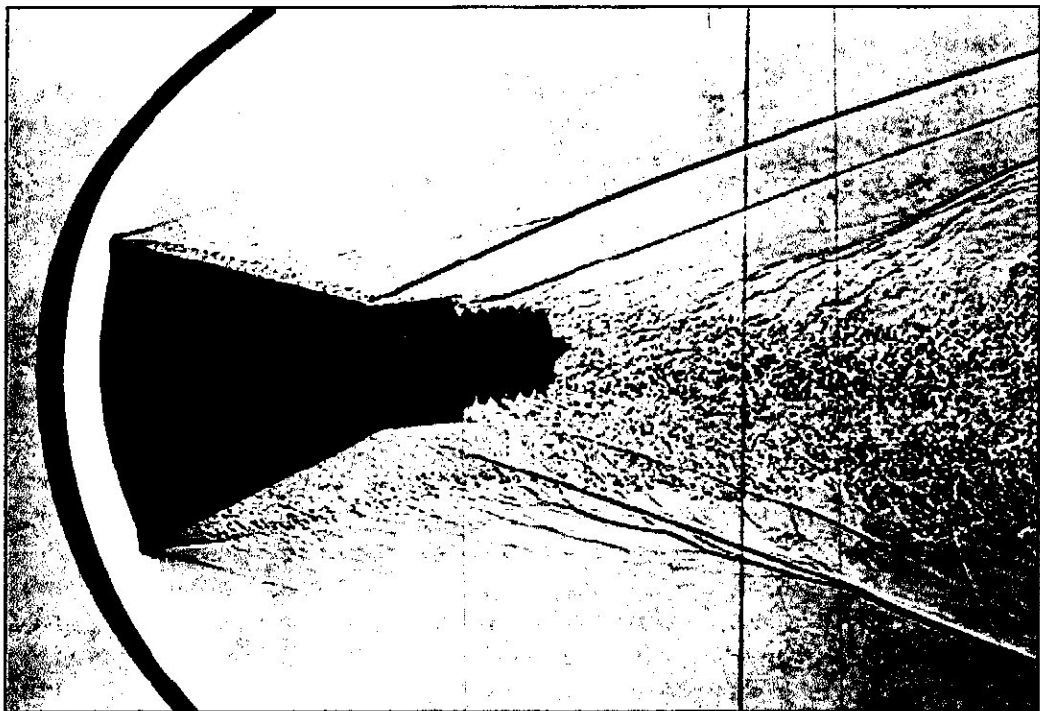


Figure 1.4 : Visualisation de l'écoulement autour d'un corps émoussé [20].



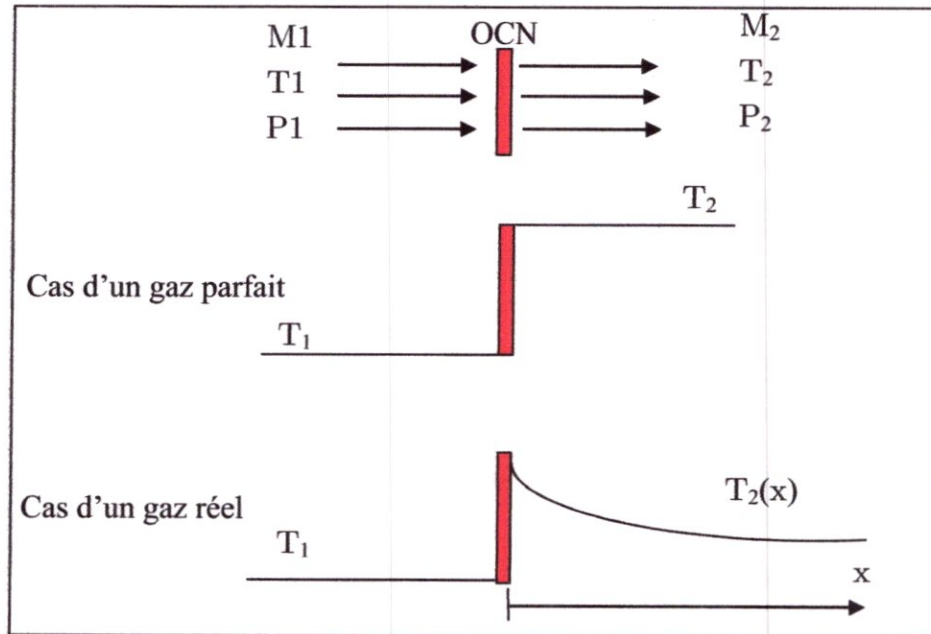


Figure 1.5 : Effet du gaz réel sur la température derrière une onde de choc normale.

## 1.6 Conclusion

Ce premier chapitre est consacré à la présentation des écoulements de la rentrée atmosphérique et les caractéristiques des écoulements, particulièrement les nombres adimensionnés tel que le nombre de Mach, le nombre de Reynolds et le nombre de Dàmkohler.

On a attaché une importance particulière à la présentation de l'onde de choc droite où on a présenté les relations de RANKINE-HUGONIOT permettant de relier les propriétés de l'écoulement entre l'amont et l'aval du choc.

La modélisation mathématique et physique des phénomènes de déséquilibre thermochimique rencontrés lors des rentrées atmosphériques fera l'objet du chapitre suivant.

## **CHAPITRE 2**

### **Modélisation mathématique et physique d'un écoulement en déséquilibre thermochimique**

## 2.1 Introduction

Dans un écoulement gazeux à grande vitesse, l'énergie cinétique importante mise en jeu peut se retrouver, à la faveur de phénomènes aérodynamiques particuliers, onde de choc par exemple, sous forme thermique favorisant par la même le déclenchement de processus physico-chimiques tels que l'excitation vibrationnelles des molécules, la dissociation de celle-ci, l'excitation électronique des molécules et des atomes ainsi formés, l'ionisation et le rayonnement. Les collisions moléculaires provoquent des échanges d'énergie entre les différents modes, les probabilités de ces processus élémentaires diffèrent de manière significative, conduisant à des temps de relaxations largement différents pour les modes internes, ainsi il devient important de prendre en considération ces processus de relaxations pour prévoir le comportement du déséquilibre. Toutefois, la maîtrise de ces phénomènes aérodynamiques et physico-chimiques est loin d'être acquise à cause de leur complexité, notamment en régime hypersonique. La simulation de ces phénomènes s'avère donc nécessaire pour bien évaluer les flux de chaleur qui se développent autour des véhicules pendant leur phase de rentrée en atmosphère planétaire.

Dans ce chapitre, on présente les équations qui régissent un écoulement de mélange de gaz réactif en déséquilibre vibrationnel et chimique dans le cas général ; écoulement tridimensionnel instationnaire. Ensuite on mentionne les hypothèses adoptées dans cette étude pour simplifier les équations. Les équations de conservation, le modèle thermodynamique, en présentant une introduction à la mécanique statistique, et le modèle de la cinétique chimique sont présentées en attachant une importance particulière à l'expression des termes sources chimiques et les termes de production vibrationnelle. Après, on présente aussi les phénomènes de couplages. En particulier, le couplage vibration-translation, couplage vibration-dissociation (CVD) et le couplage vibration-dissociation-vibration (CVDV).

## 2.2 Les équations de conservation

### 2.2.1 Conservation des espèces chimiques

Si  $s$  désigne une des espèces en présence dans le mélange, la conservation de masse de l'espèce  $s$  est donnée par [32] :

$$\frac{\overbrace{\partial \rho_s}^1}{\partial t} + \frac{\overbrace{\partial(\rho_s u_j)}^2}{\partial x_j} = \frac{\overbrace{\partial}{\partial x_j} \left( \overbrace{\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j}}^3 \right) + \overbrace{\omega_{c,s}}^4 \quad (2-1)$$

Le premier terme dans l'équation (2-1) représente le taux de variation de la masse de l'espèce  $s$  par unité de volume dans un volume de contrôle centré au point  $x_j$ , le 2<sup>ème</sup> terme est le flux de masse de l'espèce  $s$  par convection à travers les faces du VCE<sup>1</sup> avec la vitesse  $u_j$ , le 3<sup>ème</sup> terme représente la diffusion de l'espèce  $s$  à travers les faces du VCE et le 4<sup>ème</sup> terme représente le terme de production chimique de l'espèce  $s$ .

Le terme de production chimique sera discuté dans les paragraphes suivants de ce chapitre, ainsi, en explicitant son expression, le calcul détaillé sera présenté en appendice A.

### 2.2.2 L'équation de continuité globale

La conservation de la masse totale du mélange est la somme des équations de conservation de masse de chaque espèce  $s$ , l'équation de continuité globale du mélange peut s'écrire:

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

### 2.2.3 Conservation de la quantité de mouvement

Pour le mélange, l'équation de conservation de la quantité de mouvement, s'écrit :

$$\frac{\overbrace{\partial \rho u_i}^1}{\partial t} + \frac{\overbrace{\partial \rho u_i u_j}^2}{\partial x_j} = \frac{\overbrace{\partial p}^3}{\partial x_i} + \frac{\overbrace{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right]}^4 \quad (2-3)$$

Le 1<sup>er</sup> terme dans l'équation (2-3) représente le taux de variation de la  $i^{\text{ème}}$  composante de la quantité de mouvement par unité de volume dans un VCE centré au point  $x_j$ , le 2<sup>ème</sup>

<sup>1</sup> VCE : Volume de Contrôle Élémentaire.

terme représente le flux de la  $i^{\text{ème}}$  composante de la quantité de mouvement par convection à travers les faces du VCE avec la vitesse  $u_j$ , le  $3^{\text{ème}}$  terme représente les forces de la pression sur les faces du VCE dans la  $i^{\text{ème}}$  direction, et le  $4^{\text{ème}}$  terme représente les forces visqueuses agissantes sur les faces du VCE dans la  $i^{\text{ème}}$  direction.

#### 2.2.4 Conservation de l'énergie vibrationnelle :

L'équation de la conservation de l'énergie vibrationnelle est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{\overbrace{\partial \rho e_v}}{1} \frac{\overbrace{\partial}}{\partial t} + \frac{\overbrace{\partial \rho e_v u_j}}{2} \frac{\overbrace{\partial}}{\partial x_j} = \frac{\overbrace{\partial}}{\partial x_j} \left( \eta_v \frac{\overbrace{\partial T_v}}{\partial x_j} \right) + \frac{\overbrace{\partial}}{\partial x_j} \left( \rho \sum_{s=1}^5 \overbrace{h_{v,s} D_s} \frac{\overbrace{\partial \xi_s}}{\partial x_j} \right) + \\ + \sum_{s=mol} \left[ \overbrace{\omega_s^{VT}}{5} + \overbrace{\omega_s^{VE}}{6} + \overbrace{\omega_s^{VV}}{7} \right] + \overbrace{\sum_{s=mol} \omega_{c,s} \hat{D}_s} \end{aligned} \quad (2-4)$$

Les termes dans l'équation (2-4) représentent : (1) le taux de variation de l'énergie vibrationnelle par unité de volume dans le VCE centré en  $x_j$ , (2) le flux de l'énergie vibrationnelle par convection avec la vitesse  $u_j$ , (3) la conduction de l'énergie vibrationnelle à travers les faces du VCE due aux gradients des températures vibrationnelles, (4) la diffusion de l'énergie vibrationnelle à travers les faces du VCE due aux concentrations élémentaires, (5) l'échange d'énergie (relaxation) entre les modes de vibration et de translation due aux collisions entre les constituants dans le VCE, (6) l'échange d'énergie entre les modes de vibration et électronique, (7) l'échange vibration-vibration, (8) terme qui représente l'énergie vibrationnelle perdue ou gagnée due à la dissociation ou la recombinaison.

Il faut noter que l'équation de la conservation de l'énergie vibrationnelle ne concerne que les molécules.

#### 2.2.5 Conservation de l'énergie totale

L'équation de la conservation de l'énergie totale est donnée par l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
\frac{\overbrace{\partial \rho E}^1}{\partial t} + \frac{\overbrace{\partial \rho H u_j}^2}{\partial x_j} = & \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \eta \frac{\partial T}{\partial x_j} + \eta_v \frac{\partial T_v}{\partial x_j} + \eta_e \frac{\partial T_e}{\partial x_j} \right)}^3 + \\
& + \frac{\overbrace{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \sum_{s=1}^5 h_s D_s \frac{\partial \xi_s}{\partial x_j} \right)}^4 + \\
& + \overbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[ u_i \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} u_i \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right]}^5 - \overbrace{Q_{ra}}^6
\end{aligned} \tag{2-5}$$

Dans l'équation (2-5), les six termes représentent : (1) le taux de variation local de l'énergie totale par unité de volume, (2) la convection de l'enthalpie avec la vitesse  $u_j$ , (3) la conduction composée des trois contributions de translation, vibration et électronique, (4) la diffusion de l'enthalpie due aux gradients de concentrations, (5) la puissance induite par les forces visqueuses, (7) la puissance radiative perdue due aux transitions électroniques.

Les expressions de l'énergie totale  $E$ , l'énergie interne et l'enthalpie totale sont données plus loin où on présente le modèle thermochimique (§ 2.4).

### 2.3 Hypothèses

L'écoulement hors d'équilibre thermodynamique qui est décrit ici comme un milieu continu (régime collisionnel) est en réalité un écoulement tridimensionnel. Toutefois conformément à l'étude de l'écoulement monodimensionnel faite dans le chapitre suivant et la simulation en 2D faite dans le chapitre 4, les équations sont présentées sous forme simplifiée en citant les phénomènes négligés par la suite. Dans le mélange gazeux, les effets de diffusion, rayonnement, conduction et d'ionisation sont négligés, le dernier simplifie beaucoup, notamment, le modèle de la cinétique chimique en réduisant le nombre des équations de réactions chimiques élémentaires d'un modèle de 47 réactions [14] à un modèle de 17 réactions car cette hypothèse élimine les réactions qui modélisent l'excitation électronique des espèces due aux collisions inélastiques avec les électrons libres. Dans le cas de négligement des effets de viscosité (qui est le cas dans le prochain chapitre) ceci ramène les équations de Navier-Stokes à celles d'Euler. Le déséquilibre thermodynamique régnant dans le mélange gazeux induit deux températures caractérisant les énergies de chaque mode : translationnel et vibrationnel. La température de rotation est supposée être égale à la



température de translation de chaque espèce puisque les temps caractéristiques de rotation sont suffisamment courts pour que les températures de rotation et de translation s'équilibrent très rapidement, ceci peut être affirmé par le tableau (1) ci-dessous qui donne l'ordre des nombres de collisions nécessaires pour que chaque mode et la dissociation atteignent l'équilibre. L'énergie des modes de vibration des molécules est caractérisée par la température de vibration où les états de vibration des molécules sont décrits par le modèle d'oscillateur harmonique. Cette hypothèse est très bien représentée pour les niveaux de vibration les plus bas, puisque lorsque le niveau s'élève, l'écart entre les niveaux de vibration se resserre et l'hypothèse d'oscillateur harmonique doit être abandonnée. Enfin, et pour éviter la complexité due à l'instationnarité de l'écoulement, les équations régissant l'écoulement visqueux compressible hors d'équilibre thermochimique sont écrites dans un repère lié à l'onde de choc, ce qui rend donc les équations stationnaires, en admettant que l'onde de choc se propage à vitesse constante. Il est important d'indiquer que dans tout ce travail, on suppose que l'onde de choc est suffisamment détachée pour contenir une plage de relaxation.

Tableau 1: Ordre de nombre de collisions nécessaires pour l'équilibre des degrés de libertés et la dissociation : [6].

Phénomène	Nombre de collisions
Translation	$O(10)$
Rotation	$O(10)$
Vibration	$O(10^4)$
Dissociation	$> O(10^4)$

En tenant compte des hypothèses adoptées en-dessus, les équations de conservations précédentes se simplifient considérablement. Par la suite elles sont présentées sous forme éclatée.

### 2.3.1 Les équations simplifiées

- Conservation des espèces chimiques :

$$\frac{\partial \rho_s u}{\partial x} + \frac{\partial \rho_s v}{\partial y} = \omega_{c,s} \quad (2-6)$$

- Conservation de la masse du mélange total :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (2-7)$$

- Conservation de la quantité de mouvement projeté sur  $x$  et  $y$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2 + p - \tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv - \tau_{xy}) = 0 \quad (2-8)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho uv - \tau_{xy}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v^2 + p - \tau_{yy}) = 0 \quad (2-9)$$

- Conservation de l'énergie vibrationnelle :

$$\frac{\partial (\rho_s e_{v,s} u)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho_s e_{v,s} v)}{\partial y} = \omega_v \quad (2-10)$$

- Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial}{\partial x} [(\rho E + p)u - (u\tau_{xx} + v\tau_{xy})] + \frac{\partial}{\partial y} [(\rho E + p)v - (u\tau_{xy} + v\tau_{yy})] = 0 \quad (2-11)$$

Les contraintes:  $\tau_{xx}$ ,  $\tau_{xy}$  et  $\tau_{yy}$  sont données par les formules suivantes [5] :

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

$$\tau_{xy} = \frac{2}{3} \mu \left( 2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$

$$\tau_{yy} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)$$

### 2.3.2 La formulation conservative non linéaire

Dans ce cas et dans un système de coordonnées cartésiennes, ces équations d'un écoulement réactif, compressible et visqueux s'écrivent:

$$\begin{aligned}
\bar{U} &= \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho_4 \\ \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho_1 e_{v,1} \\ \rho_2 e_{v,2} \\ \rho_3 e_{v,3} \\ \rho E \end{bmatrix} ; & \bar{\Omega} &= \begin{bmatrix} \omega_{c,1} \\ \omega_{c,2} \\ \omega_{c,3} \\ \omega_{c,4} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_{v,1} \\ \omega_{v,2} \\ \omega_{v,3} \\ 0 \end{bmatrix} ; & \bar{F}_{non,v} &= \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \rho_3 u \\ \rho_4 u \\ \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho_1 e_{v,1} u \\ \rho_2 e_{v,2} u \\ \rho_3 e_{v,3} u \\ (\rho E + p)u \end{bmatrix} \\
\bar{F}_{vis} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} \end{bmatrix} ; & \bar{G}_{non,v} &= \begin{bmatrix} \rho_1 v \\ \rho_2 v \\ \rho_3 v \\ \rho_4 v \\ \rho v \\ \rho v u \\ \rho v^2 + p \\ \rho_1 e_{v,1} v \\ \rho_2 e_{v,2} v \\ \rho_3 e_{v,3} v \\ (\rho E + p)v \end{bmatrix} ; & \bar{G}_{vis} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

En introduisant ces vecteurs, le système des équations peut s'écrire alors :

$$\frac{\partial(\bar{F}_{non,v} - \bar{F}_{vis})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{G}_{non,v} - \bar{G}_{vis})}{\partial y} = \bar{\Omega} \quad (2-12)$$

## 2.4 Modélisation thermo-chimique

### 2.4.1 Les relations thermodynamiques

L'analyse des écoulements à haute température implique forcément la connaissance des propriétés thermodynamiques du gaz. Il est donc nécessaire de déterminer les expressions des différentes énergies que possèdent les espèces constituant le mélange gazeux et les autres quantités dérivées tels que : les chaleurs spécifiques et les enthalpies...etc. La mécanique statistique fournit des méthodes précises pour le calcul des propriétés thermodynamiques, dans cette section, on présente les notions nécessaires faisant partie de cette discipline, particulièrement on s'intéresse à la mécanique de BOLTZMANN permettant de développer les relations thermodynamiques qui décrivent les propriétés du mélange gazeux statistiquement ce qui nous conduit à considérer l'état microscopique du gaz.

#### 2.4.1.1 La description microscopique des gaz

En thermodynamique statistique, on s'intéresse à l'état microscopique du gaz ; en considérant que le gaz est constitué d'un grand nombre de molécules. Une molécule est une collection d'atomes liés entre eux par des forces intermoléculaires, le modèle simple est celui d'une molécule diatomique.

Lorsqu'on élève la température d'un gaz, l'agitation moléculaire augmente. Les échanges énergétiques au cours des collisions entre les particules de gaz donnent naissance aux différents phénomènes physico-chimiques.

Tout d'abord, les molécules sont excitées vibrationnellement. Considérons par exemple une molécule d'oxygène  $O_2$ , l'énergie de la molécule se répartit sur différents modes correspondants à ses degrés de liberté : translation, rotation, vibration, excitation électronique.

En effet, la molécule peut se déplacer dans l'espace, autrement dit, le centre de masse de la molécule peut se déplacer, elle possède donc une énergie de translation (figure 2.1.a). Elle peut tourner autour des trois axes orthogonaux définissant un repère dans l'espace, elle possède donc une énergie de rotation (figure 2.1.b). Les deux atomes d'oxygène  $O$ , qui la composent, peuvent vibrer autour d'une position d'équilibre au sein de la molécule [1], la



molécule possède donc une énergie de vibration (figure 2.1.c). Enfin, Les électrons sont en mouvement dans des orbites autour du noyau de chaque atome d'oxygène. Par conséquent, la molécule possède une énergie électronique (figure 2.1.d). Chacune de ces énergies est quantifiée, c.-à-d. qu'elle ne peut prendre que certaines valeurs discrètes.

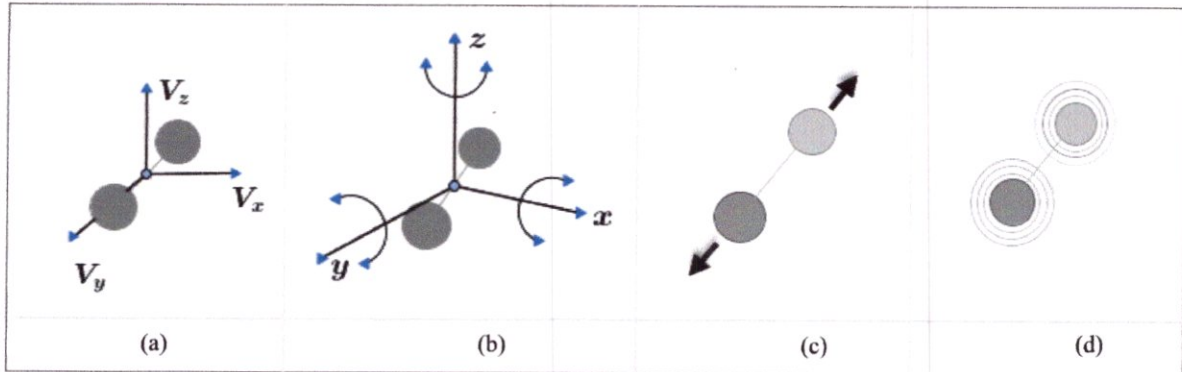


Figure 2.1 : Les différents modes d'énergie : (a) : énergie de translation, (b) : énergie de rotation, (c) : énergie de vibration, et (d) : énergie électronique.

Si les différents modes de stockage d'énergie des espèces sont supposées indépendantes les unes des autres, c'est-à-dire s'il n'y a pas de couplage entre les différents degrés de liberté de la particule (degré de translation, rotation, vibration, électronique), l'énergie interne d'une particule a pour valeur [16] [33]:

$$e_s = e_{tr,s} + e_{rot,s} + e_{v,s} + e_{el,s} \quad (2-13)$$

Les énergies de rotation et de vibration étant naturellement nulles pour les atomes.

#### 2.4.1.2 La distribution de Boltzmann et les fonctions de partitions :

La distribution de BOLTZMANN est une loi de probabilité ou distribution utilisée en physique statistique pour déterminer la répartition des particules entre différents niveaux d'énergie, elle donne le nombre de molécules  $N_j$  qui peuple un niveau d'énergie  $j$  caractérisé par une énergie  $\varepsilon_j$ , cette fonction de distribution est donnée par [4] [1] :

$$N_j = N \cdot g_j \frac{e^{-\frac{\varepsilon_j}{k_B T}}}{Q} \quad (2-14)$$

Avec :  $N = \sum_j N_j$  est le nombre de molécules,  $g_j$  est la dégénérescence ou le nombre d'états d'énergie  $\varepsilon_j$ .

$Q$  est la fonction de partition ; c'est une fonction qui décrit les propriétés statistiques d'un système en équilibre thermodynamique, son expression est donnée par :

$$Q = \sum_j g_j e^{\frac{-\varepsilon_j}{k_B T}} \quad (2-15)$$

$k_B$  est la constante de BOLTZMANN, elle est le rapport entre la constante universelle des gaz parfaits et le nombre d'Avogadro, elle vaut donc :  $k_B = \frac{R}{N_A} \approx 1.3802 \times 10^{-23}$

L'énergie moyenne par unité de masse dans le mode  $i$  (translation, rotation ...) pour une espèce  $s$  s'écrit [16] :

$$e_{i,s} = r_s T^2 \left( \frac{\partial \ln Q_{i,s}}{\partial T} \right) \quad (2-16)$$

Et dans ce cas, la chaleur spécifique à volume constant, est donnée par :

$$C_{v,s}^{(i)} = \left( \frac{\partial e_{i,s}}{\partial T} \right)$$

Dans ce qui suit, on présente les différentes fonctions de partitions pour les modes d'énergie, les expressions des énergies correspondantes et les expressions des chaleurs spécifiques des espèces.

- Mode de translation :

Pour des particules en interactions faibles, les relations suivantes sont obtenues pour le mode de translation [16] :

$$Q_{tr,s} = \left( \frac{2\pi M_s k_B T}{N_A h^2} \right)^{3/2} V \quad (2-17)$$

$$e_{tr,s} = \frac{3}{2} r_s T \quad (2-18)$$

$$C_{v,s}^{(tr)} = \frac{3}{2} r_s \quad (2-19)$$

Avec :  $h$  est la constante de PLANCK,  $h = 6.6260688 \times 10^{-34} [J \cdot s]$

- Mode de rotation :

Pour des températures suffisamment hautes, les relations suivantes sont obtenues pour le mode de rotation :

$$Q_{rot,s} = \frac{1}{\Lambda} \frac{T}{\theta_{rot,s}} \quad (2-20)$$

$$e_{rot,s} = r_s T \quad (2-21)$$

$$C_{v,s}^{(rot)} = r_s \quad (2-22)$$

Le coefficient  $\Lambda$  est un coefficient de symétrie qui vaut 2 pour les molécules homonucléaires<sup>2</sup> et 1 pour les molécules hétéronucléaires. La température caractéristique du mode de rotation  $\theta_{rot}$  est introduite pour simplifier l'expression de la fonction de partition du mode de rotation, elle a une dimension de température et est exprimée par :

$$\theta_{rot,s} = \frac{h^2}{8\pi^2 k_B I}$$

Où  $I$  est le moment d'inertie de la molécule.

- Le mode de vibration :

En tenant compte de l'hypothèse de l'oscillateur harmonique adoptée dans les hypothèses, la molécule peut être assimilée à un oscillateur harmonique de fréquence  $\nu$ . D'après la mécanique quantique, l'énergie des niveaux du mode de vibration dans ce cas est donnée par [11] :

$$\varepsilon_i = \left( i + \frac{1}{2} \right) h\nu, \quad \text{où } i = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2-23)$$

<sup>2</sup> Lorsqu'une molécule est composée d'atomes du même élément chimique, elle est dite homonucléaire, sinon on parle de molécule hétéronucléaire.

Même à l'état fondamental ( $i = 0$ ), la molécule possède une énergie vibrationnelle dite « énergie du point zéro » qui vaut :  $\varepsilon_0 = \frac{1}{2} h\nu$ . On peut éliminer cette énergie et la prendre comme état de référence, puisque cette énergie est constante et n'intervient pas dans le changement des états du système, on peut écrire :

$$\varepsilon_i = ih\nu, \quad \text{où } i = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2-24)$$

En substituant cette expression dans l'expression de la fonction de partition (2-15), on obtient la fonction de partition vibrationnelle :

$$Q_v = \sum_{i=0}^{\infty} e^{\frac{-ih\nu}{k_B T}} \quad (2-25)$$

On constate que cette série est une série géométrique sous forme  $\sum_{i=0}^{\infty} x^i$  dont la somme est donnée par :

$$\sum_{i=0}^{\infty} x^i = 1 + x + x^2 + \dots + x^i + \dots = \frac{1}{1-x}$$

Alors, si on pose  $x = e^{\frac{-h\nu}{k_B T}}$ , on obtient :

$$Q_v = \frac{1}{1 - e^{\frac{-h\nu}{k_B T}}}$$

On définit la température caractéristique de vibration par :

$$\theta_v = \frac{h\nu}{k_B} \quad (2-26)$$

Les valeurs des températures caractéristiques de vibration pour les espèces diatomiques considérées sont données en appendice C. Finalement, on aboutit à :

$$Q_{v,s} = \frac{1}{1 - e^{\frac{-\theta_{v,s}}{T}}} \quad (2-27)$$

$$e_{v,s} = \frac{r_s \theta_{v,s}}{e^{\frac{\theta_{v,s}}{T}} - 1} \quad (2-28)$$

$$C_{v,s}^{(v)} = \frac{r_s \left( \frac{\theta_{v,s}}{T} \right)^2 e^{\frac{\theta_{v,s}}{T}}}{\left[ e^{\frac{\theta_{v,s}}{T}} - 1 \right]^2} \quad (2-29)$$

La chaleur spécifique à pression constante pour une espèce est définie par :

$$C_{ps} = \left( \frac{\partial h_s}{\partial T} \right) \quad (2-30)$$

$h_s$  est l'enthalpie massique de l'espèce  $s$ , elle est définie par :

$$h_s = e_s + \frac{p_s}{\rho_s} \quad (2-31)$$

En supposant que chaque espèce obéit à la loi des gaz parfaits, la pression de l'espèce est donnée par :

$$p_s = \rho_s r_s T \quad (2-32)$$

En utilisant les équations (2.30), (2.31) et (2.32), on peut exprimer  $C_{p,s}$  sous la forme suivante :

$$C_{p,s} = C_{v,s} + r_s = C_{v,s} + \frac{R}{M_s} \quad (2-33)$$

Avec :

$$C_{v,s} = C_{v,s}^{(tr)} + C_{v,s}^{(rot)} + C_{v,s}^v \quad (2-34)$$

Concernant les propriétés du mélange gazeux, on établit les relations suivantes [32] [14]:

La masse volumique  $\rho$  du mélange est définie par :



$$\rho = \sum_s \rho_s \quad (2-35)$$

On définit la fraction massique de l'espèce  $s$  comme étant le rapport de sa masse volumique et la masse volumique du mélange :

$$Y_s = \frac{\rho_s}{\rho} \quad (2-36)$$

Il découle, facilement, de cette relation que :  $\sum_s Y_s = 1$ .

La pression du mélange est la somme des pressions partielles des espèces constituantes :

$$p = \sum_s p_s = \sum_s \rho_s r_s T = T \sum_s \rho_s \frac{R}{M_s}$$

En l'exprimant en fonction des fractions massiques :

$$p = \rho R T \sum_s \frac{Y_s}{M_s} = \rho \frac{R}{\hat{M}} T = \rho r T \quad (2-37)$$

Avec :  $r = \frac{R}{\hat{M}}$

L'énergie interne totale est donnée par :

$$e = \sum_s \frac{\rho_s e_s}{\rho} = \sum_s Y_s e_s \quad (2-38)$$

L'énergie totale  $E$  par unité de masse est la somme de l'énergie cinétique et les énergies internes [1] [32] :

$$E = \frac{1}{2} (u^2 + v^2) + \sum_s Y_s e_s \quad (2-39)$$

Les capacités calorifiques du mélange gazeux sont données par :

$$C_v = \sum_s Y_s C_{v,s} \quad (2-40)$$

$$C_p = \sum_s Y_s C_{p,s} = C_v + R \sum_s \frac{Y_s}{M_s} \quad (2-41)$$

Le rapport des chaleurs spécifiques  $\gamma$  est donné par :

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} = 1 + \frac{R}{C_v} \sum_s \frac{Y_s}{M_s} \quad (2-42)$$

L'enthalpie totale par unité de masse est donnée par :

$$H = E + \frac{p}{\rho} \quad (2-43)$$

#### 2.4.2 Le modèle de la cinétique chimique :

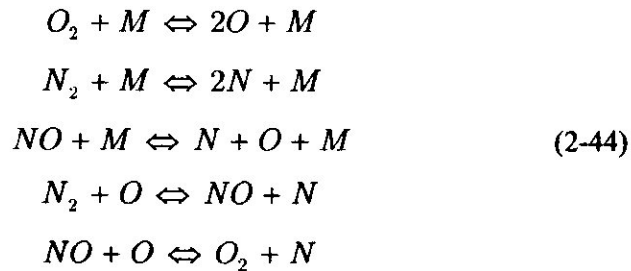
L'excitation des molécules immédiatement derrière l'onde de choc se traduit par la dissociation de celles-ci due à l'importance de la température qui règne dans la couche de choc. Dans les conditions standards, l'atmosphère terrestre est supposée être un mélange binaire de 21% de  $O_2$  et 79% de  $N_2$  (en volume), on néglige l'argon (environ 1%) et toutes les traces des autres constituants, derrière l'onde de choc normale, ces espèces se dissocient et s'ionisent en formant de nouvelles espèces, alors l'air se présente comme un mélange réactif des espèces [14] :  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$  et des espèces ionisées :  $NO^+$ ,  $O^+$ ,  $N^+$ ,  $O^-$  et des électrons libres. Dans cette étude les réactions d'ionisation, qui se produisent généralement aux très hautes températures, sont négligées.

Il est nécessaire d'adopter un modèle cinétique pour décrire le milieu réactif et d'étudier les vitesses des réactions et les taux de production des espèces pour déterminer les paramètres thermodynamiques et chimiques du mélange réactif. Dans cette étude, on considère que les espèces réagissent entre elles suivant un modèle cinétique à 17 réactions développé par ZELDOVICH [4] [28] présenté dans le tableau (2).

Tableau 2: Réactions de dissociation ( $r=1$  à 15) et d'échange ( $r=16$  à 17).

N° de la réaction	Réaction	Energie mise en jeu (ev)
$r=1$	$O_2 + O_2 \Leftrightarrow 2O + O_2$	5.12
$r=2$	$O_2 + N_2 \Leftrightarrow 2O + N_2$	5.12
$r=3$	$O_2 + NO \Leftrightarrow 2O + NO$	5.12
$r=4$	$O_2 + O \Leftrightarrow 2O + O$	5.12
$r=5$	$O_2 + N \Leftrightarrow 2O + N$	5.12
$r=6$	$N_2 + O_2 \Leftrightarrow 2N + O_2$	9.76
$r=7$	$N_2 + N_2 \Leftrightarrow 2N + N_2$	9.76
$r=8$	$N_2 + NO \Leftrightarrow 2N + NO$	9.76
$r=9$	$N_2 + O \Leftrightarrow 2N + O$	9.76
$r=10$	$N_2 + N \Leftrightarrow 2N + N$	9.76
$r=11$	$NO + O_2 \Leftrightarrow N + O + O_2$	6.49
$r=12$	$NO + N_2 \Leftrightarrow N + O + N_2$	6.49
$r=13$	$NO + NO \Leftrightarrow N + O + NO$	6.49
$r=14$	$NO + O \Leftrightarrow N + O + O$	6.49
$r=15$	$NO + N \Leftrightarrow N + O + N$	6.49
$r=16$	$N_2 + O \Leftrightarrow NO + N$	3.27
$r=17$	$NO + O \Leftrightarrow O_2 + N$	1.37

Les 15 premières réactions élémentaires de dissociation peuvent être écrite sous une forme plus compacte, en considérant le catalyseur  $M$  qui peut être l'une quelconque des cinq espèces ( $O_2, N_2, NO, O, N$ ), ce corps catalytique n'apporte rien à la réaction, son rôle étant simplement de permettre la réaction de dissociation ou de recombinaison ainsi l'ensemble des réactions chimiques élémentaires peut s'écrire :



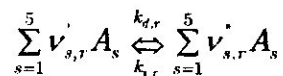
Les réactions ont été écrites dans un sens tel que la réaction directe soit endothermique, à titre indicatif, on a donné la valeur de l'énergie nécessaire pour former les produits (les espèces de droite dans les réactions) à partir des réactifs (espèces de gauche dans les réactions).

On distingue deux types de réactions dans le modèle :

- Réactions de dissociation : Ce sont les réactions  $r = 1$  à  $15$ , la dissociation des molécules derrière le choc de traduit ainsi par la diminution de la température. La prépondérance de l'azote moléculaire dans le mélange augmente la zone de déséquilibre du fait que la molécule de l'azote qui a une température caractéristique de dissociation importante, se dissocie difficilement. [15].
- Réactions d'échange : Sont les réactions  $r = 16$  et  $r = 17$ .

### 2.4.3 Taux de production des espèces chimiques :

La forme générale des réactions induites par l'ensemble des espèces chimiques s'écrit :



Où  $k_{d,r}$  et  $k_{i,r}$  représentent la vitesse de réaction directe et inverse respectivement de la réaction.  $r$

Le taux de variation de la concentration molaire de l'espèce  $s$  au cours de la réaction est donné par [11] [16]:

- Taux direct:

$$\left( \frac{d[A_s]}{dt} \right)_d = (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[ k_{d,r} \prod_{s=1}^5 [A_s]^{\nu'_{s,r}} \right] \tag{2-45}$$

- Taux inverse :

$$\left( \frac{d[A_s]_r}{dt} \right)_i = -(\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[ k_{i,r} \prod_{s=1}^5 [A_s]^{\nu'_{s,r}} \right] \quad (2-46)$$

Le taux de variation net de la concentration est donné par :

$$\frac{d[A_s]_r}{dt} = \left( \frac{d[A_s]_r}{dt} \right)_d - \left( \frac{d[A_s]_r}{dt} \right)_i$$

En substituant les termes de droite par leur expressions , on a :

$$\frac{d[A_s]_r}{dt} = (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[ k_{d,r} \prod_{s=1}^5 [A_s]^{\nu'_{s,r}} - k_{i,r} \prod_{s=1}^5 [A_s]^{\nu'_{s,r}} \right] \quad (2-47)$$

Cette équation est la forme générale de la loi d'action de masse exprimant la conservation de la masse totale au cours d'une réaction chimique.

Le taux de production massique de l'espèce  $s$  par unité de volume est donné par :

$$\omega_{c,s} = \frac{d\rho_s}{dt} = M_s \sum_{r=1}^{17} \frac{d[A_s]_r}{dt} \quad (2-48)$$

Dans la suite du travail, on préférera utiliser les fractions massiques, sachant que :

$$[A_s] = \frac{n_s}{V} = \frac{\rho_s}{M_s}, \text{ en substituant, on obtient:}$$

$$\omega_{c,s} = M_s \sum_{r=1}^{17} (\nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}) \left[ k_{d,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu'_{s,r}} - k_{i,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu'_{s,r}} \right] \quad (2-49)$$

Le calcul du terme de production chimique des espèces chimiques est détaillé en APPENDICE A.



### 2.4.3.1 La constante de vitesse directe :

Afin de pouvoir évaluer les expressions précédentes, il faut expliciter les expressions des constantes de vitesse des réactions, la constante de vitesse directe est donnée par la loi d'ARRHENIUS [22] [11] :

$$k_{d,r} = C_r T^{n_r} e^{\frac{-\theta_{d,r}}{T}} \quad (2-50)$$

Les constantes  $C_r$ ,  $n_r$  et les températures de dissociation  $\theta_{d,r}$  (ou d'activation) pour chaque réaction sont données dans l'appendice B.

### 2.4.3.2 La constante de vitesse inverse :

La constante de vitesse inverse est quant à elle déterminée par le rapport de la constante de vitesse directe par la constante d'équilibre  $k_{eq,r}$  :

$$k_{i,r} = \frac{k_{d,r}}{k_{eq,r}} \quad (2-51)$$

La constante d'équilibre est déterminée par les fonctions de partition des espèces [15] dont les constantes sont données par les tables thermodynamiques. Cependant PARK [22] a employé la forme suivante :

$$k_{eq} = \exp(C_{0,r} + C_{1,r}z + C_{2,r}z^2 + C_{3,r}z^3 + C_{4,r}z^4) \quad (2-52)$$

Avec :  $z = \frac{10^4}{T}$ , les coefficients  $C_{0,r}, C_{1,r}, \dots, C_{4,r}$  sont données en appendice B.

## 2.4.4 Modélisation du déséquilibre vibrationnel

Lorsque l'écoulement gazeux est à grande vitesse et pour des nombres de Mach supérieur à 4 [15], l'énergie cinétique importante mise en œuvre peut se retrouver sous forme thermique favorisant par la même l'excitation aussi bien des modes de rotation que des modes de vibration derrière l'onde de choc. On rappelle que les molécules sont décrites comme des oscillateurs harmoniques dont l'énergie d'un niveau de vibration est donnée par la relation (2-24) avec l'état fondamental étant pris comme origine des niveaux de vibration. Les molécules excités en vibration sont supposées avoir la distribution de Boltzmann à la température de vibration  $T_{v,s}$  et la relaxation de molécules excitées vers leurs états d'équilibre se fait à travers

une série de distribution de BOLTZMANN. On ne présente ici que les contributions du couplage translation-vibration.

#### 2.4.4.1 Le terme source de vibration

- *Par unité de masse :*

Le modèle d'échange d'énergie entre les modes de translation et les modes de vibration est décrit par la formule de LANDAU-TELLER [8] où les transitions vibrationnelles sont supposées se produire seulement entre niveaux voisins.

L'équation d'évolution de l'énergie de vibration peut être écrite comme suit [11] :

$$\frac{de_{v,s}}{dt} = \frac{e_{v,s}^*(T) - e_{v,s}(T_{v,s})}{\tau_s^{VT}(T, p)} \quad (2-53)$$

Où  $e_{v,s}^*(T)$  est la valeur de l'énergie de vibration à l'équilibre, et  $e_{v,s}(T_{v,s})$  est l'énergie de vibration instantanée à la température vibrationnelle de l'espèce chimique  $s$ ,  $\tau_s^{VT}(T, p)$  qui est fonction de la température et de la pression est appelé temps de relaxation.

Cette relation montre que l'énergie de vibration doit toujours tendre vers sa valeur d'équilibre, le temps de relaxation caractérise le temps nécessaire pour que l'énergie de vibration rejoigne son état d'équilibre. Ainsi plus ce temps est court, plus les processus de relaxation seront rapides.

- *Par unité de volume :*

Comme nous nous intéressons plutôt à l'évolution de l'énergie par unité de volume, la dérivée de  $\rho_s e_{v,s}$  permet d'obtenir :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_s e_{v,s}}{dt} &= \rho_s \frac{de_{v,s}}{dt} + e_{v,s} \frac{d\rho_s}{dt} = \rho_s \frac{de_{v,s}}{dt} + e_{v,s} \omega_{c,s} \\ &= \rho_s \frac{e_{v,s}^*(T) - e_{v,s}(T_{v,s})}{\tau_s^{VT}(T, p)} + e_{v,s} \omega_{c,s} \end{aligned}$$

Nous retrouvons dans cette relation, l'expression (2-53), on pose :

$$\omega_s^{VT} = \rho_s \frac{e_{v,s}^*(T) - e_{v,s}(T_{v,s})}{\tau_s^{VT}(T, p)} + e_{v,s} \omega_{c,s} \quad (2-54)$$

Où  $\omega_s^{VT}$  est le terme de production d'énergie de vibration de l'espèce  $s$ , ce terme source de vibration est donc la somme de deux termes. Le premier a été explicité plus haut et correspond au modèle de LANDAU-TELLER, le second  $e_{v,s} \omega_{c,s}$  résulte de la dérivation. Il caractérise le transfert entre l'énergie chimique et l'énergie vibrationnelle.

#### 2.4.4.2 Temps de relaxation de vibration :

La détermination du temps caractéristique de relaxation de vibration nécessaire pour que le gaz en hors d'équilibre vibrationnel retrouve un état d'équilibre, a fait l'objet de nombreux travaux expérimentaux. Le mélange dont on étudie les propriétés thermodynamiques et chimiques provient de la décomposition de l'air à haute température et à forte pression (le mélange considéré étant composé de 5 espèces). Le modèle de LANDAU-TELLER doit être ajusté pour tenir en compte de la présence de ces cinq espèces et donc de la possibilité que les molécules hors d'équilibre vibrationnel ( $O_2$ ,  $N_2$  et  $NO$ ) de rencontrer une particule parmi les cinq types. En particulier, il faut définir un temps de relaxation vibrationnelle  $\tau_s$  d'une molécule vibrant dans le mélange gazeux à 5 espèces.

Ce temps est obtenu simplement en prenant en compte les temps de relaxation vibrationnelle de l'espèce  $s$  dans le mélange binaire ( $s, s'$ ) et les fractions molaires  $\xi$  de chacune des 5 espèces [16]:

$$\frac{1}{\tau_s} = \sum_{s'=1}^5 \frac{\xi_{s'}}{\tau_{s,s'}} \quad (2-55)$$

Dans ce cas, une molécule excitée peut échanger de l'énergie de vibration avec une espèce monoatomique ou diatomique, qui, elle, récupérera ou cédera cette énergie sous forme translationnelle. Les temps de relaxation utilisés ici sont les temps donnés par la formule de MILLIKAN & WHITE [31] valable entre 300-8000 K [32]:

$$\tau_{s,s'}^{MW} = \frac{B}{p} \exp \left[ A_{s,s'} \left( T^{-1/3} - 0.015 \mu_{s,s'}^{1/4} \right) - 18.42 \right] \quad (2-56)$$

Où  $\tau_{s,s'}$  est le temps caractéristique de vibration de l'espèce  $s$  dans un mélange contenant l'espèce  $s'$  tel que :  $s = (O_2, N_2, NO)$  et  $s' = (O_2, N_2, NO, O, N)$ , ainsi :

$$A_{s,s'} = 1.16 \times 10^{-3} \times \mu_{s,s'} \theta_{v,s}^{4/3} \quad (2-57)$$

Avec :

$$\mu_{s,s'} = \frac{M_s M_{s'}}{M_s + M_{s'}} \quad (2-58)$$

Où  $\mu_{s,s'}$  : est la masse réduite,

$M_s, M_{s'}$  : Sont les masses molaires des espèces  $s$  et  $s'$ ,

$p$  : est la pression totale du mélange exprimé en Pascal [Pa].

Et  $B = 1.013 \times 10^5$  [Pa].

Finalement,  $\tau_s^{MW}$  est calculé par la formule (2-55).

Notons que la théorie de LANDAU-TELLER est ainsi basée sur les hypothèses fondamentales suivantes :

- Les transitions entre niveaux de vibration sont uniquement monoquantum, c'est-à-dire. Les échanges entre oscillateurs lors d'une collision ont lieu seulement entre des états voisins.
- La distribution de population sur les niveaux de vibration est Boltzmannienne.

Cette théorie décrit ainsi bien le phénomène d'échange d'énergie entre les modes de translation et les modes de vibration surtout à des températures de l'ordre de 5000 K.

Cependant, à haute température, les valeurs des mesures expérimentales sont très différentes des valeurs théoriques données par la formule (2-54). PARK [22] a donc proposé une formule empirique qui corrige l'insuffisance de la théorie de LANDAU-TELLER à haute température.

Dans ces conditions, la formule (2-54) devient :

$$\omega_{v,s}^{VT} = \rho_s \frac{e_{v,s}^*(T) - e_{v,s}(T_{v,s})}{\tau_s^{VT}} f_s + e_{v,s} \omega_{c,s} \quad (2-59)$$

L'expression de  $f_s$  derrière l'onde de choc établie pour le cas d'un mélange [22] est donnée par :

$$f_s = \left( \frac{T_{ch} - T_{v,s}}{T_{ch} - T_{v,s,ch}} \right)^{S_s-1} \quad (2-60)$$

Où  $T_{ch}$  et  $T_{v,s,ch}$  sont respectivement la température translationnelle et la température vibrationnelle de la molécule  $s$  déterminée juste en aval du choc.

Avec :

$$S_s = 3.5 \times e^{\frac{\theta_s}{T_{ch}}} \quad (2-61)$$

$\theta_s$  est la température caractéristique de l'espèce  $s$ , elle vaut :

$$\theta_{O_2} = 3350 \text{ K}, \theta_{N_2} = 5000 \text{ K}, \theta_{NO} = 4040 \text{ K}$$

### Remarque

Il ne faut pas confondre la température caractéristique de l'espèce avec sa température caractéristique de vibration, la température caractéristique de vibration de chaque espèce est donnée en APPENDICE C.

Comme on a indiqué en haut, la formule de MILLIKAN & WHITE est valable dans une plage de température comprise entre 300 et 8000 (K). Pour des températures plus élevées, PARK a proposé une formule pour corriger le temps de relaxation de vibration de la forme [32] [21]:

$$\tau_{s,s'}^P = \frac{1}{\sigma_v \bar{c}_s N_{s'}} \quad (2-62)$$

Où

- $\bar{c}_s$  est la vitesse moléculaire moyenne de la molécule  $s$  en  $[m.s^{-1}]$ , exprimée par :

$$\bar{c}_s = \left( \frac{8k_B T}{\pi m_s} \right)^{1/2} \quad (2-63)$$

Ici  $m_s$  est la masse de la particule, c.à.d. en kg/molécule . On peut exprimer (2-63) en fonction de la masse molaire de la molécule  $s$  . Sachant que la constante de BOLTZMANN est exprimée par  $k_B = \frac{R}{N_A}$  , on a alors :

$$\bar{c}_s = \left( \frac{8RT}{\pi M_s} \right)^{1/2} \quad (2-64)$$

Si  $s$  se trouve dans un mélange,  $M_s$  peut être remplacée par la masse réduite des deux molécules en collisions,  $s$  et  $s'$ , l'expression devient alors :

$$\bar{c}_s = \left( \frac{8RT}{\pi \mu_{s,s'}} \right)^{1/2} \quad (2-65)$$

- $\sigma_s$  est la section efficace de collision en  $[m^2]$ , exprimée par :

$$\sigma_v = d \times \left( \frac{5 \times 10^4}{T} \right)^2 \quad (2-66)$$

D'après [21],  $d$ , pour la plupart des gaz, est compris entre :  $10^{-21}$  et  $3 \times 10^{-21}$  . Dans notre cas, on prend  $d = 10^{-21}$  .

- $N_s$  est la densité numérique de l'espèce  $s$  (nombre de particules par unité de volume, c'est-à-dire en  $[m^{-3}]$ ), exprimée par :

$$N_s = \frac{\xi_s \rho N_A}{\sum_{s=1}^6 \xi_s M_s} = \frac{\xi_s \rho N_A}{\hat{M}} \quad (2-67)$$



Ainsi le temps de relaxation globale s'écrit :

$$\tau_s^{VT} = \left[ \sum_{s'=1}^5 \frac{\xi_{s'}}{\tau_{s,s'}^{MW} + \tau_{s,s'}^P} \right]^{-1} \quad (2-68)$$

## 2.5 Couplage « Chimie-Vibration »

Plus les molécules vibrent, plus elles sont susceptibles de se dissocier. Inversement, plus les molécules se dissocient plus l'énergie de vibration moyenne de celle-ci diminue. Cette approche, un peu simpliste, permet de comprendre l'influence du mode de vibration sur les réactions chimiques et vice versa. Il existe, dans la littérature, différentes façons, plus ou moins complexes, de prendre en compte le couplage « chimie-vibration ».

Certains auteurs ne tiennent compte que de l'influence de la vibration sur la dissociation. Seule la constante directe de dissociation est modifiée. Elle n'est plus calculée en fonction de la température de translation-rotation du mélange mais en fonction de la racine carrée du produit de la température de vibration par la température du mélange [23]. Mais dans ce cas l'énergie de vibration ne se trouve pas affectée par la dissociation. Pour se rapprocher de la réalité, ce couplage peut être évalué en faisant une étude par niveau de vibration de la molécule. On peut concevoir qu'une molécule fortement excitée vibrationnellement se dissociera plus facilement qu'une molécule faiblement excitée. Autrement dit, la probabilité de dissociation de molécules situées sur les hauts niveaux de vibration est supérieure à celle des molécules des bas niveaux. Nous parlons alors de couplage préférentiel.

Dans la suite, on ne traite pas de façon détaillée ces deux cas de couplage, car, ceci dépasse le cadre de ce travail. Il est donc convenable, juste de présenter les uns les plus utilisés, à titre d'exemple, le modèle de PARK.

### 2.5.1 Influence de la vibration sur la dissociation (CVD)

C'est un modèle non préférentiel, c.à.d. Nous nous plaçons dans le cas où la molécule peut se dissocier quel que soit le niveau de vibration sur lequel elle se trouve. Cette situation ne reflète certainement pas tous les cas. Toutefois cette approche traduit l'influence de la vibration sur la dissociation.

Il existe plusieurs modèles de couplage vibration-dissociation, comme on a indiqué, on ne présente que le modèle de PARK :

### 2.5.1.1 Modèle de PARK

Il s'agit essentiellement de corrélations de données expérimentales concernant des écoulements d'azote et d'oxygène en tube à choc. PARK exprime alors la constante de vitesse de dissociation en régime de non équilibre vibrationnel en utilisant une loi d'ARRHENIUS dans laquelle la température de translation a été remplacée par une température fictive « moyenne »  $T_a$  tenant compte à la fois de la température de translation-rotation et de celle de vibration.

La constante de vitesse hors d'équilibre pour ce modèle s'écrit alors :

$$k_d(T, T_v) = k_d(T_a) \quad (2-69)$$

Compte tenu des résultats expérimentaux obtenus en tube à choc, PARK propose pour  $T_a$  une formule de type :

$$T_a = T^q T_v^{1-q} \quad (2-70)$$

Où  $q$  est le paramètre de ce modèle.

Ainsi le facteur de couplage, qui est le rapport entre la constante de vitesse évaluée en déséquilibre vibrationnel et la constante de vitesse évaluée à l'équilibre, est donnée par :

$$V_d(T, T_v) = \frac{k_d(T, T_v)}{k_d(T)} \quad (2-71)$$

La constante de vitesse directe est donnée par la formule (2-50), en substituant, on trouve :

$$V_d(T, T_v) = (T^{q-1} T_v^{1-q})^n \frac{\exp\left(-\frac{\theta_d}{T^q T_v^{1-q}}\right)}{\exp\left(-\frac{\theta_d}{T}\right)} \quad (2-72)$$

PARK a choisi tout d'abord  $q = 0.5$  (dans ce cas :  $T_a = \sqrt{T \cdot T_v}$ ). Puis, à la suite des travaux récents l'ont conduit à une modification de la valeur de ce paramètre et il a proposé pour  $q$  une valeur entre 0.5 et 0.7, minimisant ainsi les effets du déséquilibre vibrationnel sur la constante de dissociation. La simplicité de ce modèle explique en partie sa popularité.

### 2.5.2 Influence de la chimie sur la vibration : couplage CVDV

C'est un modèle appelé préférentiel, car, en réalité une molécule se dissocie plus facilement lorsqu'elle se trouve sur un niveau haut excité en vibration et la probabilité de dissociation doit varier en fonction du niveau de vibration. Cette hypothèse revient à privilégier la dissociation sur les hauts niveaux excités. On impose ainsi de ce fait une probabilité de dissociation différente sur les niveaux à partir desquels la molécule se dissocie.

Dans cette catégorie, le modèle le plus utilisé est celui de TREANOR et MARRONE [27]. Dans ce modèle la fonction de distribution est décrite par une fonction exponentielle de telle manière que la probabilité de dissociation soit forte sur les hauts niveaux excités en vibration. Dans ces conditions, la probabilité de dissociation d'une molécule sur un niveau de vibration  $j$  s'écrit :

$$p_j = \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{k_B T_f}\right)}{Q_v(T_f)} \quad (2-73)$$

Rappelons que  $Q_v$  est la fonction de partition de vibration.

Avec :

$$\frac{1}{T_f} = \frac{1}{T_v} - \frac{1}{T} - \frac{1}{U} \quad (2-74)$$

Le paramètre d'ajustement  $U$ , ayant la dimension d'une température décrit la rapidité avec laquelle la probabilité de dissociation augmente sur les hauts niveaux de vibrations. Lorsque  $U$  tend vers l'infini le modèle de couplage correspond ainsi au modèle non-préférentiel.

Le facteur de couplage dans le cas préférentiel prend la forme suivante :

$$V_d = \frac{Q_v(T) Q_v(T_f)}{Q_v(T_v) Q_v(-U)} \quad (2-75)$$

## 2.6 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre la modélisation mathématique et physique d'un écoulement d'air en déséquilibre chimique et vibrationnel. On a explicité le modèle de la cinétique chimique avec les réactions élémentaires considérées, les constantes de vitesses de ces réactions. On a également modélisé le déséquilibre vibrationnel et les transferts entre le mode de vibration et celui de la translation. Finalement, on a présenté brièvement le couplage chimie-vibration, particulièrement le couplage CVD de PARK.

Afin d'éclairer ces phénomènes de non-équilibre thermo-chimique, on propose une application en aval d'une onde de choc droite qui est l'objet du chapitre suivant.

## **CHAPITRE 3**

### **Application à un écoulement monodimensionnel à l'aval d'une onde de choc droite**

### 3.1 Introduction

On a présenté, dans le chapitre précédent, le modèle mathématique et physique permettant de décrire les phénomènes de déséquilibre thermo-chimique à haute température. Dans ce présent chapitre on se propose d'étudier l'écoulement à l'aval d'une onde de choc afin d'évaluer l'influence des différents processus pris en compte dans le modèle considéré. En tenant compte des hypothèses adoptées dans le chapitre précédent permettant d'établir le modèle, on rappelle ici que l'étude actuelle réalisée dans le présent chapitre suppose un écoulement d'air en déséquilibre thermo-chimique monodimensionnel non visqueux ; ce qui réduit les équations de conservations de Navier-Stokes aux celles d'Euler. Le repère étant lié à l'onde de choc ce qui permet d'éliminer le caractère d'instantanéité de l'écoulement. Conformément à ces hypothèses, le système des équations sera présenté de manière simplifiée et par la suite une méthode numérique sera présentée pour résoudre le système pour déterminer les différents paramètres de l'écoulement. En général, une onde de choc est assimilée à une discontinuité des grandeurs macroscopiques ( $p, \rho, T, U$ ) séparant deux milieux gazeux [3] comme l'illustre la figure)3.1) :

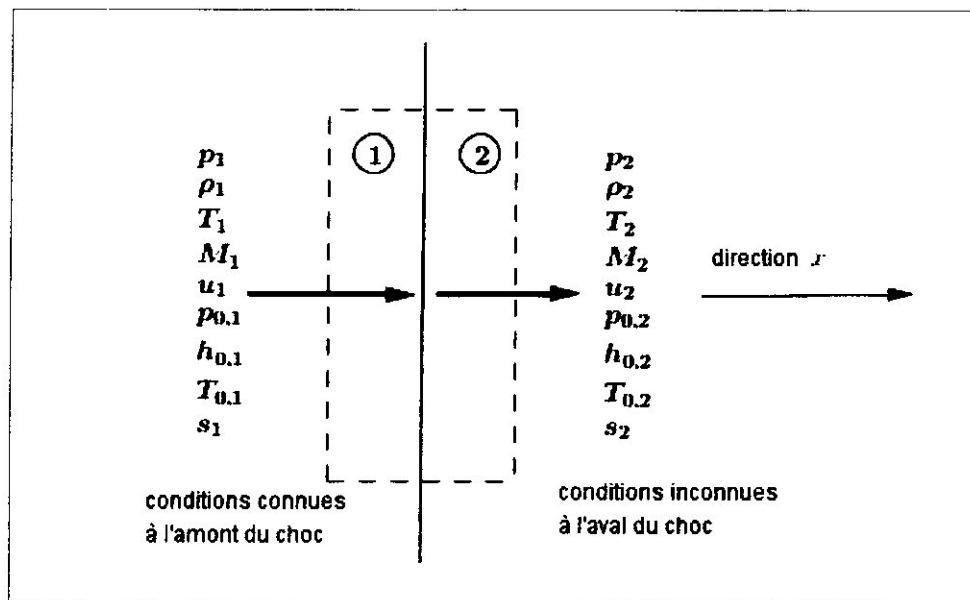


Figure 3.1: Choc droit et volume de contrôle.

Avant le passage du choc, le gaz est à l'équilibre thermodynamique. Lorsque les molécules traversent l'onde de choc, on peut admettre que l'épaisseur du choc contient une distance nécessaire pour que l'équilibre sur les modes de translation et de rotation soit atteint



alors qu'il faut un nombre beaucoup plus important de collisions entre les molécules pour que le mode de vibration atteigne un état d'équilibre (cf. Tableau 1, Chapitre 2). Immédiatement à l'aval du choc l'écoulement est dans un état figé : c.à.d. non dissocié et non excité vibrationnellement, puisque le temps caractéristique de traversé du choc est très court devant le temps caractéristique des divers phénomènes collisionnels et donc presque toute l'énergie est concentré sous forme d'énergie translationnelle et rotationnelle, toutefois l'énergie de vibration que possède les molécules étant la même que en amont de l'onde de choc.

En suivant l'écoulement plus en aval du choc, le mode vibrationnel s'excite progressivement sous l'effet des collisions moléculaires. Par ailleurs, pour des chocs intenses, lorsque les collisions deviennent suffisamment violentes, les interactions engendrent des processus de dissociation ; et du fait de l'interaction de ces deux phénomènes (vibrationnel et chimique), la cinétique des réactions de dissociation et de recombinaison des molécules est modifiée, ainsi que corrélativement, la relaxation vibrationnelle. Ensuite peu à peu et selon leur propre temps caractéristique, les différents processus font évoluer le système vers l'état d'équilibre déterminé par l'intensité du choc et les conditions amont.

Le calcul des grandeurs de l'écoulement à l'aval d'une onde de choc droite nécessite la connaissance des conditions en amont du point où se produit le choc. On choisit ici certaines conditions typiques de la rentrée atmosphérique de la navette « Hermès » proposées aux laboratoires européens en 1986 par la société Dassault aviation [18], ces conditions sont données dans le tableau (3.1) dont lequel on va prendre les points H3 et H4 pour examiner les différentes configurations de relaxation.

Tableau 3.1 : Caractéristiques des six points typiques de la trajectoire de rentrée estimée de la navette Hermès.

Point	Altitude (Km)	Nombre de Mach	Vitesse (m/s)	Température (K)	Pression (Pa)
H1	75	25	7181	205.3	2.5
H2	72	22.5	6598	214.0	4.1
H3	66	19	5839	235.0	9.9
H4	61	16.3	5208	254.0	19.7
H5	55	12.2	3989	266.0	43
H6	48	8.1	2673	271.0	102.3

### 3.2 Paramètres macroscopique sur le front du choc

Dans un système de référence sur la surface arrière de l'onde de choc, l'abscisse  $x = 0$  correspond à la position du choc et les conditions en ce point sont obtenues en appliquant les relations de RANKINE-HUGONIOT présentés dans le premier chapitre, rappelons ici les relations suivantes qui permettent de déterminer les grandeurs  $\rho, u, T$  et  $p$  juste après l'onde de choc pour  $\gamma$  supposé constant:

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)M_1^2}{2 + (\gamma - 1)M_1^2} \quad (3-1)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \left( \frac{2\gamma}{\gamma + 1} M_1^2 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} + \frac{2}{(\gamma + 1)M_1^2} \right) \quad (3-2)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\gamma}{\gamma + 1} M_1^2 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \quad (3-3)$$

Avec :  $M_1 = \frac{u_1}{\sqrt{\gamma r T_1}}$  et  $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$

L'indice « 1 » représente l'état de l'écoulement avant l'onde de choc où le milieu est supposé en équilibre thermodynamique alors que l'indice « 2 » représente l'état de l'écoulement juste après le choc où le gaz est en hors d'équilibre thermochimique. La connaissance des grandeurs est primordiale pour résoudre le système des équations.

On va donc dans un premier temps résoudre le système des équations de bilan du fluide avec les équations de relaxation de vibration sur  $O_2, N_2$  et  $NO$  décrite au chapitre précédent.

### 3.3 Système d'équations différentielles

Le système d'équations se réduit en adoptant les hypothèses mentionnées au début de ce chapitre au système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\rho Y_s u)}{dx} = \omega_{c,s} \end{array} \right. \quad (3-4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\rho u)}{dx} = 0 \end{array} \right. \quad (3-5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\rho u^2 + p)}{dx} = 0 \end{array} \right. \quad (3-6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[(\rho E + p)u]}{dx} = 0 \end{array} \right. \quad (3-7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(\rho Y_s e_{v,s} u)}{dx} = \omega_{v,s} \end{array} \right. \quad (3-8)$$

Sous forme vectorielle, ce système d'équations s'écrit :

$$\frac{d\bar{F}}{dx} = \bar{\Omega} \quad (3-9)$$

Avec :

$$\bar{F} = \begin{bmatrix} \rho Y_s u \\ \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho E + p)u \\ \rho Y_s e_{v,s} u \end{bmatrix}; \quad \bar{\Omega} = \begin{bmatrix} \omega_{c,s} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_{v,s} \end{bmatrix} \quad (3-10)$$

Où les vecteurs  $\bar{F}$  et  $\bar{\Omega}$  représentent respectivement les flux conservatifs et les termes source.

### 3.4 Fermeture du système :

On dispose d'un système composé de 11 équations tandis que le nombre de variables à déterminer est 12 :

- Les fractions massiques des 5 espèces ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $O$ ,  $N$ ).
- La masse volumique du mélange :  $\rho$ .
- La pression du mélange :  $p$ .
- La vitesse :  $u$ .
- La température de translation-rotation :  $T$ .

- Les températures de vibration des espèces ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ )

Compte tenu du nombre de variables prises en considération dans le système d'équations, il est nécessaire de clore les équations par une équation d'état du fluide reliant les variables précédant entre elles. Le fluide étant supposé être composé d'un mélange de gaz parfaits, l'équation d'état du fluide reliant la pression à la température de translation-rotation et la masse volumique des espèces est donnée par:

$$p = \rho r T \quad (3-11)$$

En vertu du système ci-dessus, on dispose d'un outil théorique qui nous permet de décrire l'évolution des différentes grandeurs de l'écoulement réactif en déséquilibre thermochimique derrière une onde de choc. Dans le paragraphe suivant, on expose la méthode de résolution du système d'équations ainsi établi.

### 3.5 Résolution numérique

Après établissement des équations de conservation et des équations de relaxation, il nous faut résoudre numériquement les équations de conservation couplées aux équations de relaxation. Ces équations écrites dans un repère lié à l'onde de choc se déplaçant à vitesse constante.

A part dans quelques cas très particuliers, il est impossible de calculer explicitement des solutions des systèmes d'équations différentielles aux dérivées partielles. Il est donc nécessaire d'avoir recours au calcul numérique sur ordinateur pour estimer ces solutions. Le principe de toutes les méthodes de résolution numérique des équations aux dérivées partielles est d'obtenir des valeurs numériques discrètes (c'est-à-dire en nombre fini) qui approchent la solution exacte. Dans ce procédé il faut bien être conscient de deux points fondamentaux, premièrement, on ne calcule pas des solutions exactes mais approchées. Deuxièmement, on discrétise le problème en représentant des fonctions par un nombre fini de valeurs, c'est-à-dire que l'on passe du "continu" au "discret".

Il existe de nombreuses méthodes d'approximation numérique des solutions d'équations aux dérivées partielles. Nous présentons maintenant une des plus anciennes et des plus simples, appelée méthode des différences finies.

Cette méthode est une technique courante de recherche de solutions approchées d'équations aux dérivées partielles qui consiste à résoudre un système de relations (schéma numérique) liant les valeurs des fonctions inconnues en certains points suffisamment proches les uns des autres. En apparence, cette méthode apparaît comme étant la plus simple à mettre en œuvre par rapport aux autres méthodes numériques.

### 3.5.1 Présentation de la méthode des différences finies

En utilisant le développement en séries de Taylor, on peut développer une fonction  $f(x)$  autour d'un point  $x$ , soit :

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x^2 + \frac{f'''(x)}{3!} \Delta x^3 + \dots \quad (3-12)$$

D'où, on obtient :

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x + \frac{f'''(x)}{3!} \Delta x^2 + \dots \quad (3-13)$$

On peut écrire aussi :

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x) + O(\Delta x) \quad (3-14)$$

$O(\Delta x)$  : est appelé l'erreur de troncature à l'ordre 1. Si l'on élimine, on commet une erreur de troncature, d'où l'approximation suivante :

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (3-15)$$

Ce schéma est appelé : différence avant. On peut aussi remplacer  $\Delta x$  par  $(-\Delta x)$  dans l'équation (3-12) :

$$f(x - \Delta x) = f(x) - f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x^2 - \frac{f'''(x)}{3!} \Delta x^3 + \dots \quad (3-16)$$

Or :

$$\frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} = f'(x) + O(\Delta x) \tag{3-17}$$

Ce schéma est appelé différence arrière, il est aussi de l'ordre 1 .

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \tag{3-18}$$

Il une autre approche consiste à soustraire l'équation (3-16) de l'équation (3-12) pour trouver :

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} = f'(x) + \frac{2f''(x)}{3!} \Delta x^2 + \dots = f'(x) + O(\Delta x^2) \tag{3-19}$$

C'est une approximation de la dérivée première à l'ordre 2, ce schéma est appelé un schéma centré.

La figure 3.2) montre les trois schémas permettant d'approximer la dérivée d'une fonction en un point :

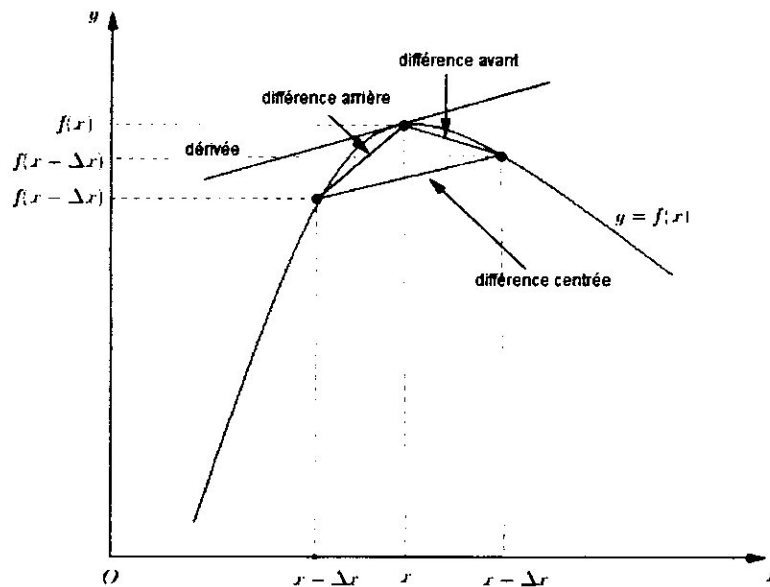


Figure 3.2 : illustration des trois schémas de différences finies pour l'approximation de la dérivée d'une fonction.

On peut écrire les relations précédentes en utilisant une notation indicielles pour simplifier l'écriture. Au point d'indice  $i$  :



- Différence avant :  $\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}$  ;
- Différence arrière :  $\frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}$  ;
- Différence centrée :  $\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}$ .

### 3.5.2 Maillage :

la ligne de départ est prise pour  $j = 1$  qui coïncide avec le choc où les caractéristiques de l'écoulement sont celles d'un gaz parfait. A la ligne de départ nous avons seulement l'air composé de deux espèces diatomiques qui sont l'azote moléculaire  $N_2$  et l'oxygène moléculaire  $O_2$ , donc dans cette ligne les fractions massiques de  $NO$  et des espèces monoatomiques sont nulles et le gaz se trouve en déséquilibre thermo-chimique. La plage après l'onde choc est appelée « plage de relaxation », dans cette plage, les différents processus tendent vers l'équilibre. On chaque nœud illustré dans la figure suivante on doit résoudre le système d'équations établi précédemment pour trouver les paramètres thermodynamiques de l'écoulement.

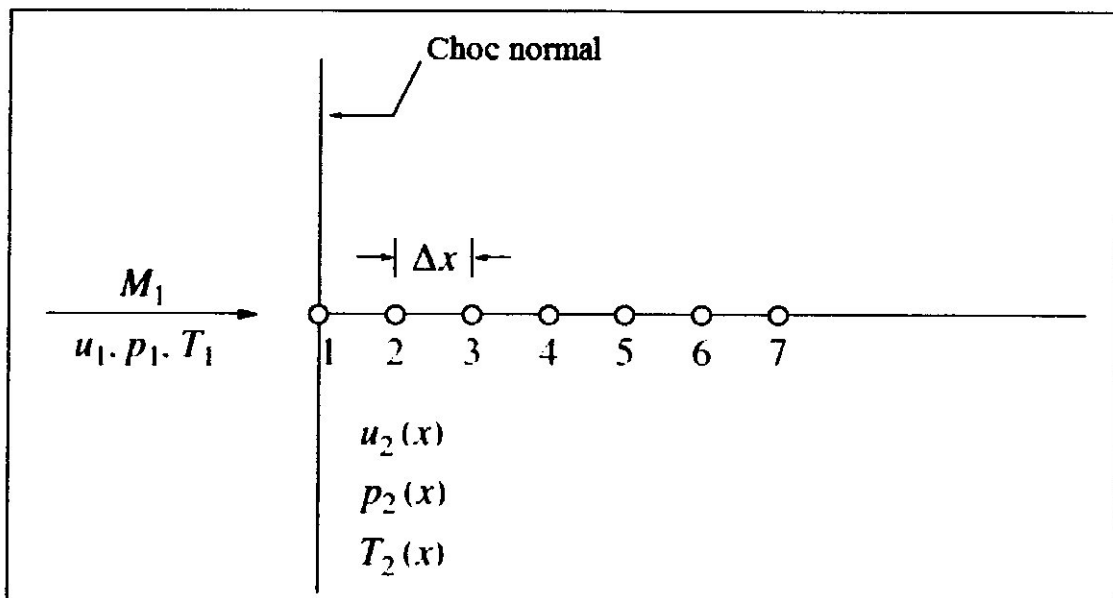


Figure 3.3 : Maillage du domaine de calcul.

Dans la suite, on discrétise le système des équations :

- L'équation de continuité:

$$\frac{\rho_{j+1}u_{j+1} - \rho_j u_j}{\Delta x} = 0, \text{ on obtient :}$$

$$\rho_{j+1} \cdot u_{j+1} = \rho_j \cdot u_j \quad (3-20)$$

- L'équation de quantité de mouvement:

$$\frac{\rho_{j+1}u_{j+1}^2 + p_{j+1} - \rho_j u_j^2 + p_j}{\Delta x} = 0, \text{ on obtient :}$$

$$\rho_{j+1}u_{j+1}^2 + p_{j+1} - \rho_j u_j^2 + p_j \quad (3-21)$$

- L'équation de l'énergie :

Avant de discrétiser cette équation, on la simplifie :

$$\frac{d[(\rho E + p)u]}{dx} = \frac{d[\rho u H]}{dx} = \frac{d(\rho u)}{dx} H + \rho u \frac{dH}{dx} = 0 \Rightarrow \frac{dH}{dx} = 0$$

$H$  : est l'enthalpie totale massique, donnée par la formule (2-43), on obtient en discrétisant l'équation suivante :

$$\begin{aligned} C_{v,j+1} \cdot T_{j+1} + \sum_{s=1}^5 Y_{s,j+1} e_{v,s,j+1} + \sum_{s=3}^5 Y_{s,j+1} h_{f,s}^0 + \frac{u_{j+1}^2}{2} = \\ C_{v,j} \cdot T_j + \sum_{s=1}^5 Y_{s,j} e_{v,s,j} + \sum_{s=3}^5 Y_{s,j} h_{f,s}^0 + \frac{u_j^2}{2} \end{aligned} \quad (3-22)$$

- Les équations de conservation des espèces chimiques :

Pour chaque espèce  $s$ , on a:

$$\frac{d(Y_s \rho u)}{dx} = \frac{d(\rho u)}{dx} Y_s + \rho u \frac{dY_s}{dx} = \omega_{c,s} \Rightarrow \frac{dY_s}{dx} = \frac{\omega_{c,s}}{\rho u}, \text{ alors :}$$

$$\frac{Y_{s,j+1} - Y_{s,j}}{\Delta x} = \frac{1}{\rho_j u_j} \omega_{c,s}, \text{ on obtient :}$$

$$Y_{s,j+1} = \frac{\Delta x}{\rho_j u_j} \omega_{c,s} + Y_{s,j} \quad (3-23)$$

- L'équation de l'énergie vibrationnelle :

$$\frac{d(\rho Y_s e_{v,s} u)}{dx} = \omega_{v,s} \Rightarrow \frac{d(Y_s \rho u)}{dx} e_{v,s} + Y_s \rho u \frac{de_{v,s}}{dx} = \omega_{v,s}$$

Sachant que le terme source de vibration  $\omega_{v,s}$  par unité de volume est donné par la formule (2-53), en le remplaçant, on a :

$\frac{d(Y_s \rho u)}{dx} e_{v,s} + Y_s \rho u \frac{de_{v,s}}{dx} = \rho_s \frac{e_{v,s}^* - e_{v,s}}{\tau_s} f_s + e_{v,s} \omega_{c,s}$ , en tenant compte de l'équation de conservation des espèces, l'expression devient :

$u \frac{de_{v,s}}{dx} = \frac{e_{v,s}^* - e_{v,s}}{\tau_s} \Rightarrow \frac{de_{v,s}}{dx} = \frac{e_{v,s}^* - e_{v,s}}{u \cdot \tau_s} f_s$ , finalement, on discrétisant cette équation, on obtient :

$$e_{v,s,j+1} = \frac{\Delta x}{u_j \cdot \tau_{s,j}} (e_{v,s,j}^* - e_{v,s,j}) \cdot f_s + e_{v,s,j} \quad (3-24)$$

La température de vibration de chaque espèce  $T_{v,s}$  au nœud  $j$  sera donc déduite de l'expression de l'énergie vibrationnelle sachant que :

$$T_{v,s} = \frac{\theta_{v,s}}{\ln \left[ \frac{r_s \theta_{v,s}}{e_{v,s}} + 1 \right]} \quad (3-25)$$

L'équation de l'état est utilisée pour déterminer la température :

$$T_{j+1} = \frac{P_{j+1}}{\rho_{j+1} \cdot r_{j+1}} \quad (3-26)$$

Une fois les équations algébriques précédentes sont résolues, les autres grandeurs sont déduites facilement, ainsi :

$$r_{j+1} = \sum_{s=1}^5 Y_{s,j+1} \cdot r_s \quad (3-1)$$

$$C_{p,j+1} = \sum_{s=1}^5 Y_{s,j+1} \cdot C_{p,s} \quad (3-2)$$

$$C_{v,j+1} = \sum_{s=1}^5 Y_{s,j+1} \cdot C_{v,s} \quad (3-3)$$

### 3.6 Aspect algorithmique

Pour résoudre le système d'équations algébrique obtenu en discrétisant les équations différentielles, on peut utiliser 2 méthodes :

#### 3.6.1 La première méthode :

Quant à la phase de mise en œuvre algorithmique, elle est basée sur les substitutions successives, à cause du caractère de non linéarité du système, il est difficile de résoudre le système. Alors, pour calculer les grandeurs au nœud  $j+1$ , on doit : estimer une température  $T_{est} = T_j - \delta T$  pour évaluer les différentes expressions des grandeurs inconnues, on continue

à augmenter  $\delta T$  jusqu'à satisfaire :  $\frac{|T_{j+1} - T_{est}|}{T_{j+1}} \leq \varepsilon_1$ , où  $\varepsilon_1$  est une valeur infinitésimale.

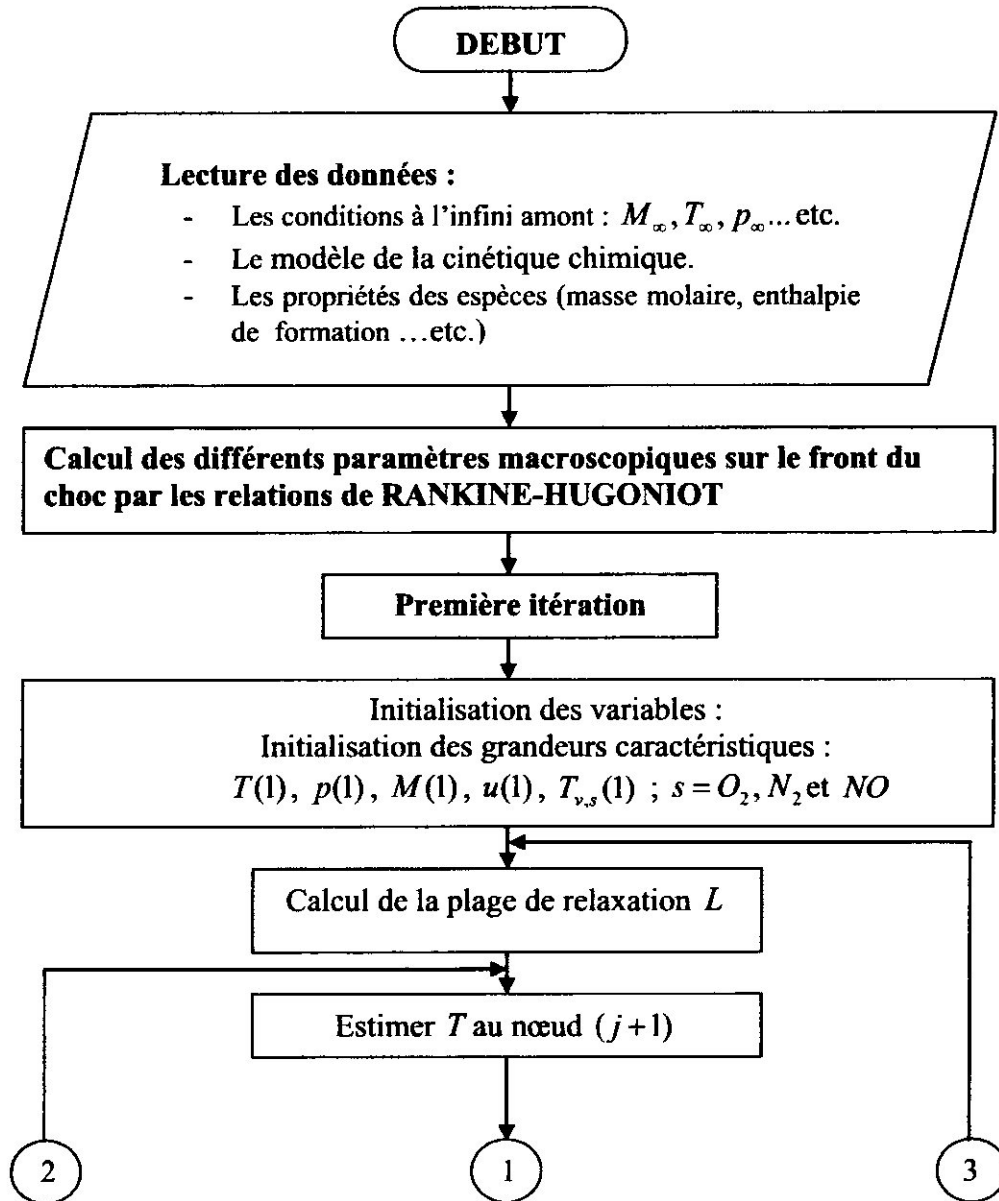
On refait les mêmes opérations pour calculer les grandeurs en chaque nœud suivant jusqu'à atteindre l'équilibre c'est-à-dire : la température translationnelle  $T$  est presque égale les températures vibrationnelles des molécules  $O_2, N_2$  et  $NO$  où le critère suivant doit être satisfait :

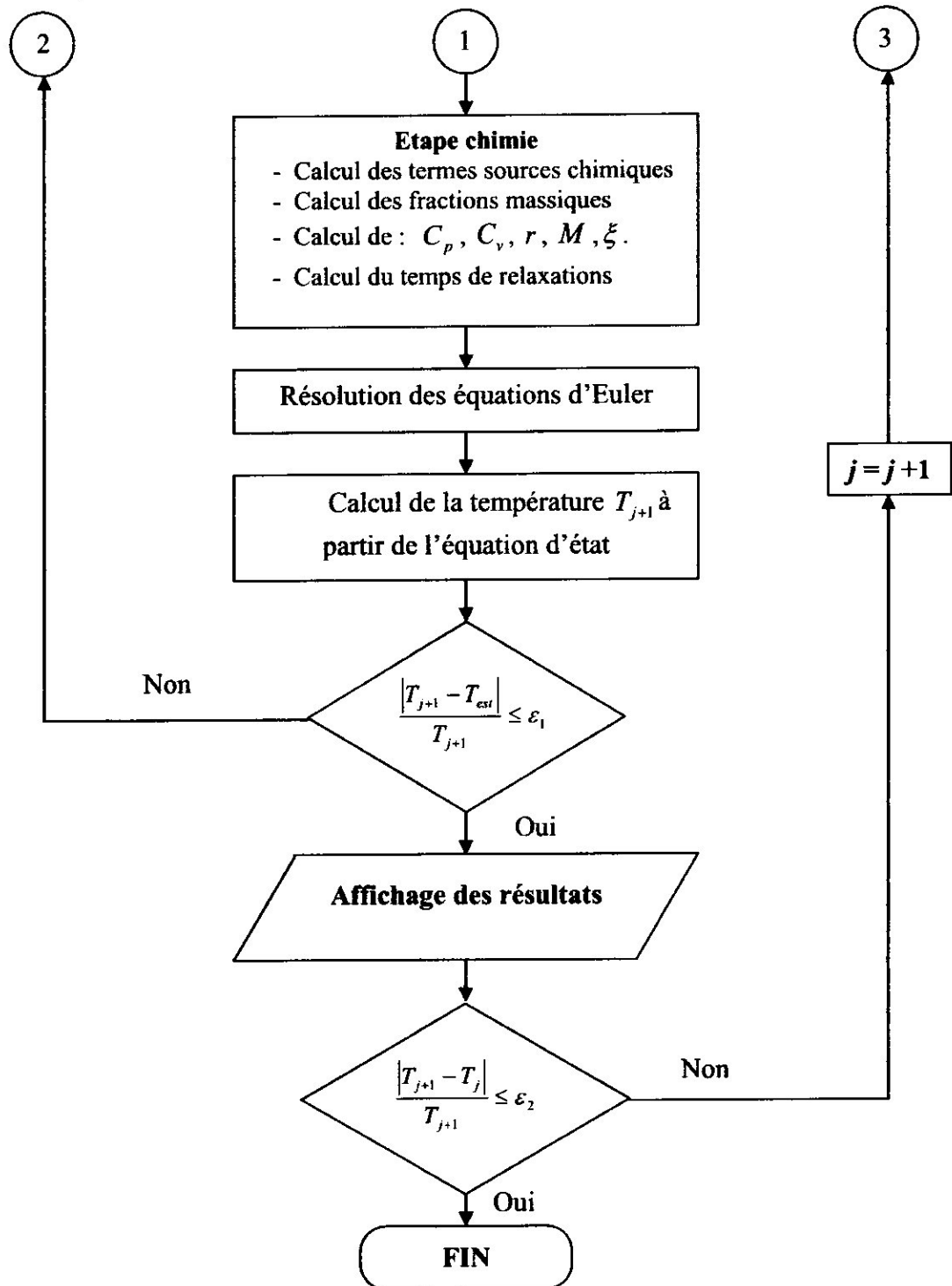
$$\frac{|T_{j+1} - T_j|}{T_{j+1}} \leq \varepsilon_2 \quad (3-4)$$

$\varepsilon_2$  : est une valeur infinitésimale.

Le déroulement de calcul et ses étapes principales sont présentés dans l'organigramme suivant :

## 3.6.1.1 Organigramme







### 3.6.2 La deuxième méthode

La deuxième méthode consiste à résoudre le système d'équations algébriques non linéaires par une méthode efficace sans faire recours à l'estimation d'une température pour évaluer les différentes expressions. La méthode de Newton [34] [9] pour la résolution des systèmes non linéaires s'avère donc nécessaire à manipuler. Cette méthode est relativement difficile à mettre en application, car, si on dispose d'un système à  $n$  équations, elle nécessite le calcul de  $n^2$  dérivées partielles. En plus, on doit estimer initialement à chaque nœud le vecteur des inconnues à déterminer, ceci pose un problème de convergence si ce vecteur est mal choisi. Dans notre cas, on peut s'assurer de la convergence de la méthode, si on raffine suffisamment le maillage, autrement dit, les nœuds sont proches les uns des autres pour que le vecteur solution obtenu au nœud  $j$  peut être utilisé comme un vecteur initial pour la détermination du vecteur solution au nœud suivant.

Dans ce qui suit, on présente la méthode de Newton et on montre comment résoudre le système à l'aide d'une suite de problèmes linéaires. Après, on présente l'algorithme de résolution.

#### 3.6.2.1 Présentation de la méthode Newton

Soit le système de  $n$  équations non linéaire :

$$\begin{aligned}
 f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\
 f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\
 f_3(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\
 &\vdots \\
 f_n(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0
 \end{aligned}
 \tag{3-27}$$

Soit  $\vec{x}^0 = [x_1^0, x_2^0, x_3^0, \dots, x_n^0]^T$  une approximation initiale de la solution de système, le but de ce qui suit est de déterminer une correction  $\delta\vec{x}^0 = [\delta x_1^0, \delta x_2^0, \delta x_3^0, \dots, \delta x_n^0]^T$  au vecteur précédant de telle sorte que :

$$\begin{aligned}
 f_1(x_1^0 + \delta x_1^0, x_2^0 + \delta x_2^0, x_3^0 + \delta x_3^0, \dots, x_n^0 + \delta x_n^0) &= 0 \\
 f_2(x_1^0 + \delta x_1^0, x_2^0 + \delta x_2^0, x_3^0 + \delta x_3^0, \dots, x_n^0 + \delta x_n^0) &= 0 \\
 f_3(x_1^0 + \delta x_1^0, x_2^0 + \delta x_2^0, x_3^0 + \delta x_3^0, \dots, x_n^0 + \delta x_n^0) &= 0 \\
 \vdots & \\
 f_n(x_1^0 + \delta x_1^0, x_2^0 + \delta x_2^0, x_3^0 + \delta x_3^0, \dots, x_n^0 + \delta x_n^0) &= 0
 \end{aligned}$$

Pour déterminer le vecteur de correction  $\delta \vec{x}^{-0}$ , il suffit de faire un développement de Taylor en  $n$  variables pour chacune des  $n$  fonctions, si on se limite qu'à l'ordre 1, on obtient :

$$\begin{aligned}
 f_1(\vec{x}^{-0}) + \delta x_1^0 \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} + \delta x_2^0 \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} + \delta x_3^0 \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} + \dots + \delta x_n^0 \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} &= 0 \\
 f_2(\vec{x}^{-0}) + \delta x_1^0 \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} + \delta x_2^0 \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} + \delta x_3^0 \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} + \dots + \delta x_n^0 \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} &= 0 \\
 f_3(\vec{x}^{-0}) + \delta x_1^0 \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} + \delta x_2^0 \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} + \delta x_3^0 \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} + \dots + \delta x_n^0 \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} &= 0 \\
 \vdots & \\
 f_n(\vec{x}^{-0}) + \delta x_1^0 \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} + \delta x_2^0 \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} + \delta x_3^0 \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} + \dots + \delta x_n^0 \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} &= 0
 \end{aligned}$$

Sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix}
 \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} & \dots & \frac{\partial f_1(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} \\
 \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} & \dots & \frac{\partial f_2(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} \\
 \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} & \dots & \frac{\partial f_3(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_2} & \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_3} & \dots & \frac{\partial f_n(\vec{x}^{-0})}{\partial x_n}
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \delta x_1^0 \\
 \delta x_2^0 \\
 \delta x_3^0 \\
 \vdots \\
 \delta x_n^0
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 -f_1(\vec{x}^{-0}) \\
 -f_2(\vec{x}^{-0}) \\
 -f_3(\vec{x}^{-0}) \\
 \vdots \\
 -f_n(\vec{x}^{-0})
 \end{bmatrix}
 \tag{3-28}$$

Ce système linéaire s'écrit également sous une forme plus compacte :

$$J(\vec{x}^{-0}) \delta \vec{x}^{-0} = -\vec{R}(\vec{x}^{-0}) \tag{3-29}$$

Où  $J(\vec{x}^{-0})$  désigne la matrice des dérivées partielles ou matrice jacobienne évalué au vecteur  $\vec{x}^{-0}$ , où  $\delta\vec{x}^{-0}$  est le vecteur des corrections relatives à chaque variable et où  $-\vec{R}(\vec{x}^{-0})$  est le vecteur résidu évalué au  $\vec{x}^{-0}$ .

On pose ensuite :

$$\vec{x}^{-1} = \vec{x}^{-0} + \delta\vec{x}^{-0}$$

Qui est la nouvelle approximation de la solution du système non linéaire. On cherchera par la suite à corriger  $\vec{x}^{-1}$  d'une nouvelle quantité  $\delta\vec{x}^{-1}$ , et ce jusqu'à la convergence.

L'algorithme est le suivant :

1. Etant donné  $\vec{x}^{-0} = [x_1^0, x_2^0, x_3^0, \dots, x_n^0]^T$  une approximation initiale de la solution du système et un critère d'arrêt  $\varepsilon$ .
2. Résoudre le système :

$$J(\vec{x}^{-0})\delta\vec{x}^{-0} = -\vec{R}(\vec{x}^{-0})$$

Et poser :

$$\vec{x}^{-i+1} = \vec{x}^{-i} + \delta\vec{x}^{-i}$$

3. Si  $\max\left(\left|\delta\vec{x}^{-i}\right|\right) < \varepsilon$  et  $\max\left(\left|R(\vec{x}^{-i+1})\right|\right) < \varepsilon$  :
  - Convergence atteinte, écrire la solution  $\vec{x}^{-i+1}$
  - Arrêt.
4. Retour à l'étape 2.

On a présenté l'algorithme de cette méthode, il est facile de l'appliquer pour résoudre le système d'équations algébriques qu'on a obtenu en discrétisant le système d'équations différentielles par la méthode des différences finies. Dans notre cas, on doit résoudre ce système en chaque nœud.

Le vecteur à déterminer au nœud  $j+1$  est :

$$\vec{r} = [\rho_{j+1}, u_{j+1}, p_{j+1}, T_{j+1}, Y_{1,j+1}, Y_{2,j+1}, Y_{3,j+1}, Y_{4,j+1}, Y_{5,j+1}, e_{v,1,j+1}, e_{v,2,j+1}, e_{v,3,j+1}]^T \quad (3-30)$$

$Y_{1,j+1}, \dots, Y_{5,j+1}$  : désignent les fractions massiques des espèces  $O_2, N_2, NO, O$  et  $N$

respectivement, et  $e_{v,1,j+1} \dots e_{v,3,j+1}$  désignent les énergies de vibration des molécules  $O_2, N_2$  et  $NO$  respectivement.

**Remarque :**

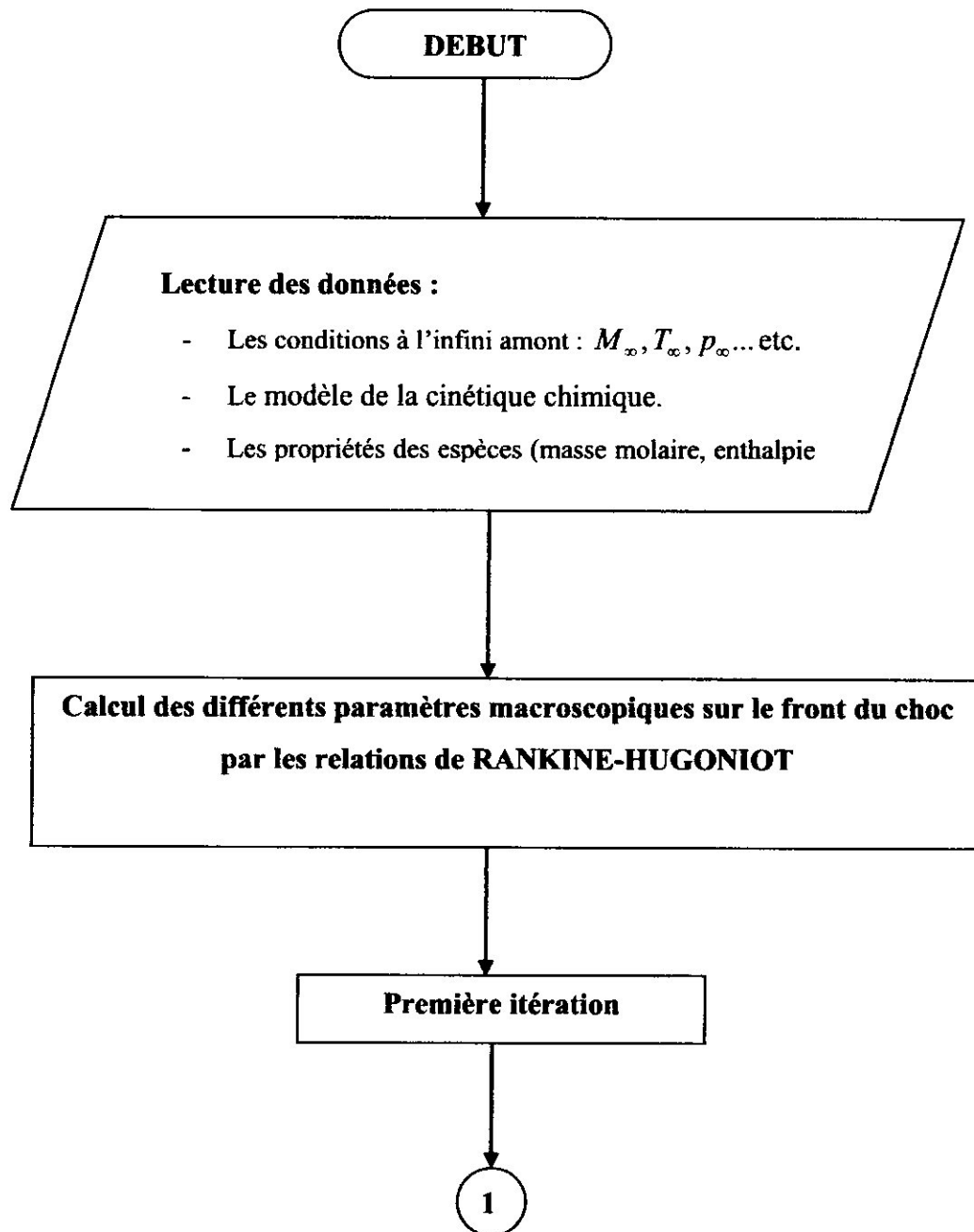
Le nombre de variables à déterminer peut être réduit à 11, en particulier, on peut considérer que les 4 premières fractions massiques des espèces, l'autre peut être déterminée par la relation suivante :

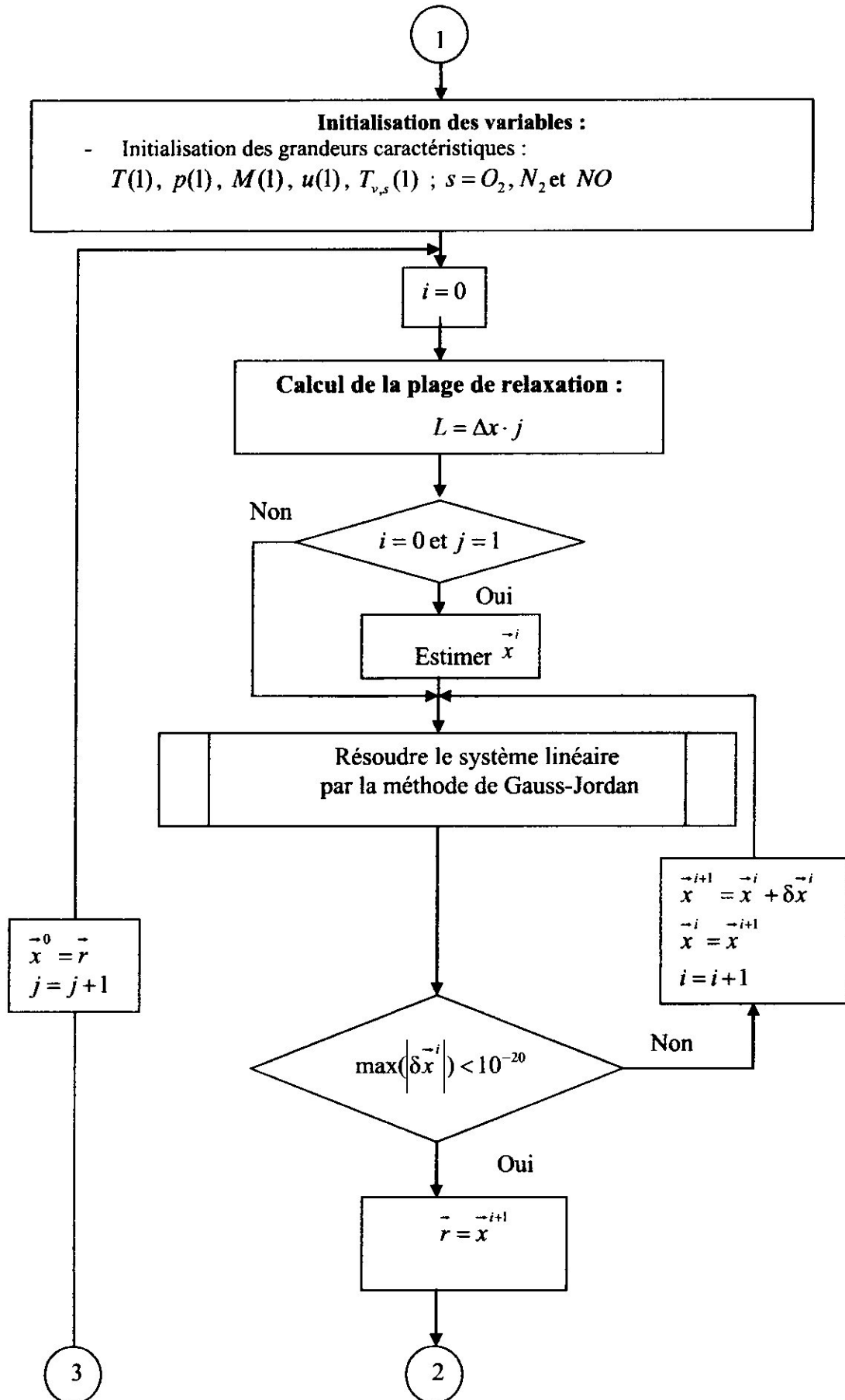
$$Y_{5,j+1} = 1 - \sum_{s=1}^4 Y_{s,j+1} \quad (3-31)$$

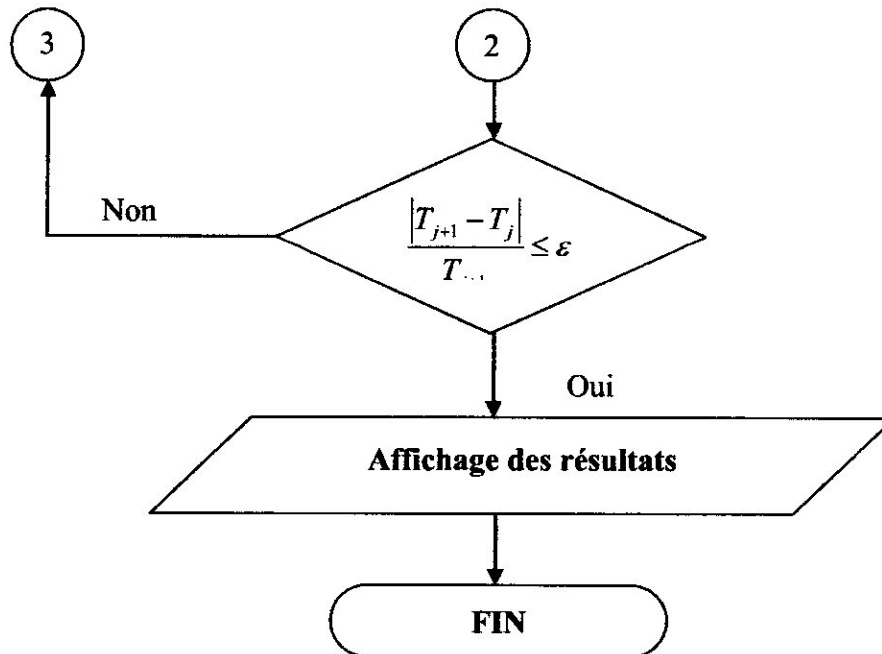
Pour appliquer la méthode de Newton, le système d'équations algébriques obtenu par la discrétisation, doit être mis sous la forme (3-27). Par la suite il nous faut calculer les dérivées partielles de ces fonctions, cette procédure est un peu délicate vu de la complexité des expressions. Il faut donc avoir recours aux logiciels de calcul formel (symbolique). On peut aussi utiliser des méthodes numériques (par exemple : différentiation numérique) pour évaluer ces dérivées, mais ceci peut induire l'accumulation des différentes erreurs. Pour s'affranchir de ce problème, on a développé un algorithme de calcul des dérivées exactes des fonctions en utilisant des notions avancées de la programmation orientée objet particulièrement, les classes et les surcharges (overloading). Il en résultera un algorithme de « différentiation automatique »

Finalement, le déroulement de cette 2<sup>ème</sup> méthode adoptée pour résoudre le problème est illustré dans l'organigramme suivant :

## 3.6.3 Organigramme de la méthode







### 3.7 Présentation du programme

Dans ce paragraphe, on va présenter le programme de calcul réalisé pour cette étude. Il est programmé en langage Fortran en utilisant principalement les notions introduites en « Fortran 2003 », autrement dit, la programmation orientée objet « POO ». Pour faciliter l'interaction avec le programme, on a programmé l'interface graphique par le langage de programmation « Visual Basic.NET 2010 ». Ce dernier permet une manipulation interactive et facile du programme.

Premièrement, on doit spécifier les différents paramètres de l'écoulement avant le choc, la méthode de la résolution...etc. (figure 3.4). Après, A partir de la barre des outils, on doit opter pour le modèle de la cinétique chimique (figure 3.5), les propriétés du fluide...etc., et d'autres options concernant la configuration. Par exemple, le programme doit établir une connexion à la base de données (figure 3.6) qui contient les différentes constantes et les divers modèles des constantes de vitesse des réactions.

Le programme dispose ainsi d'autres options quant à la visualisation des résultats où il va générer le script GNUPLOT nécessaire pour la visualisation de différentes grandeurs dans la couche de choc.



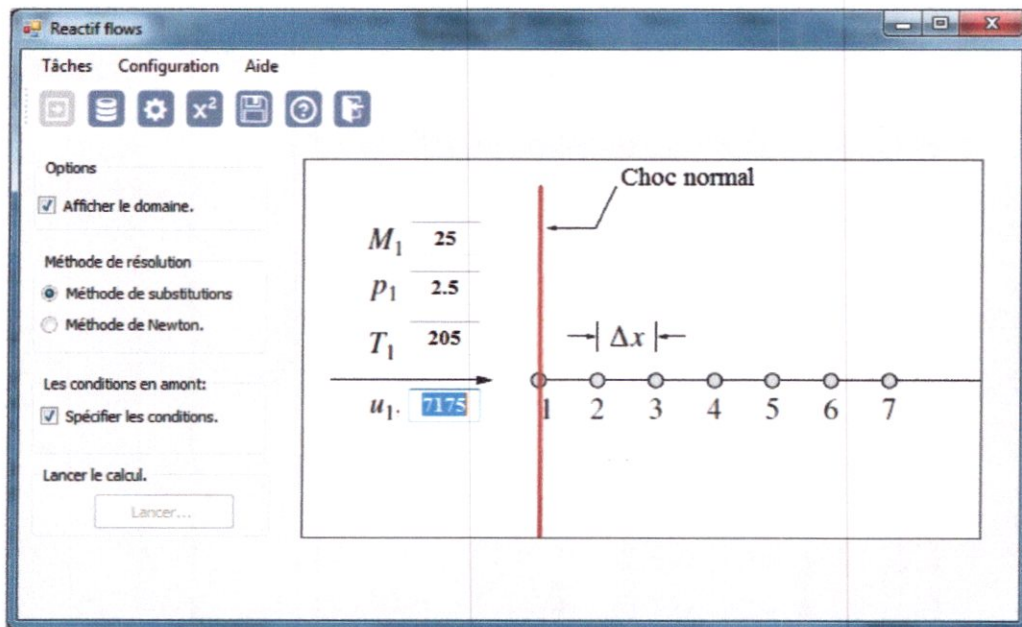


Figure 3.4 : La fenêtre principale du programme de calcul.

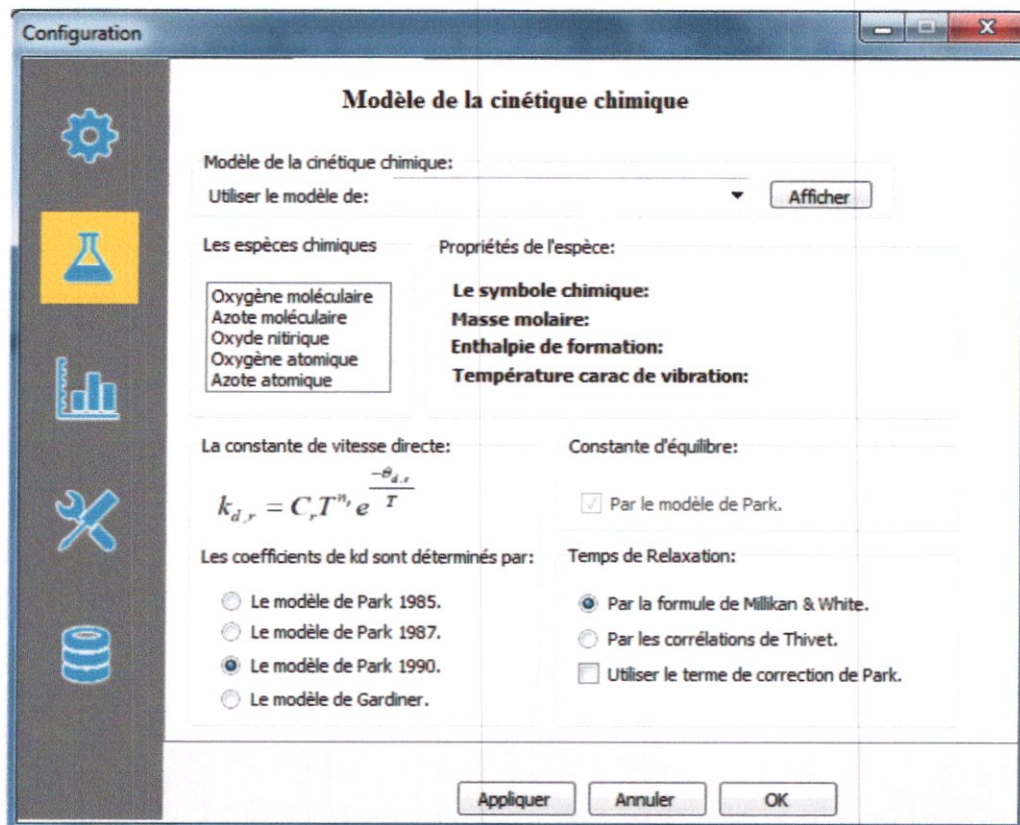


Figure 3.5 : Fenêtre pour spécifier le modèle de la cinétique chimique.

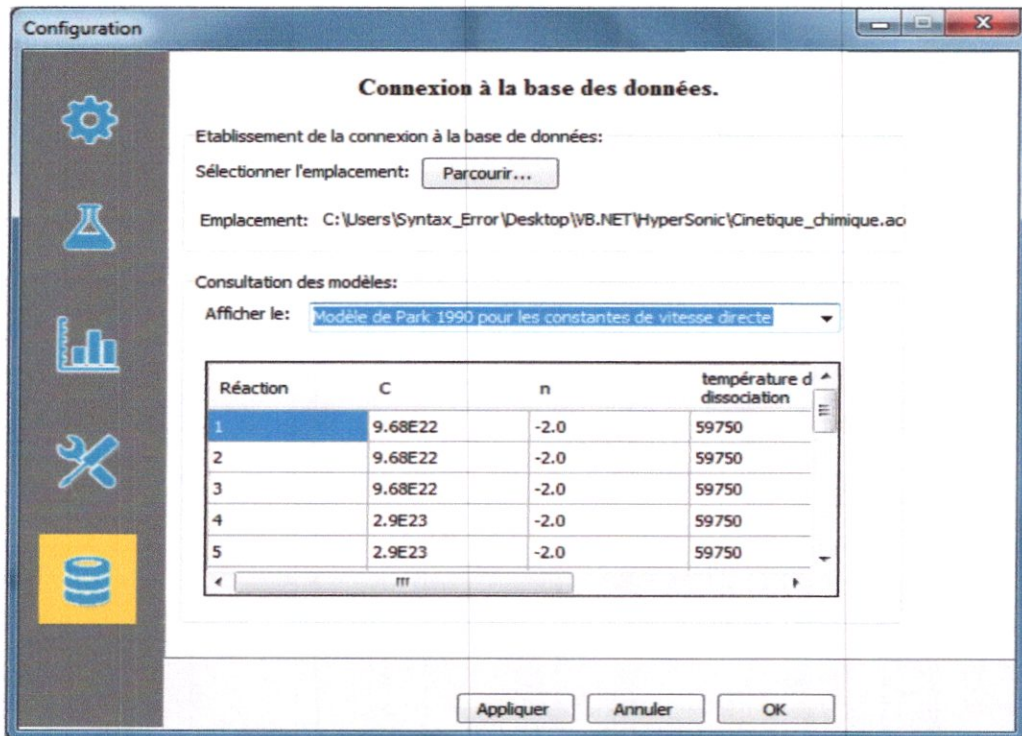


Figure 3.6 : Fenêtre pour l'établissement de la connexion à la base de données.

### 3.8 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre une application du modèle établi précédemment dans le chapitre 2 à une onde de choc droite pour modéliser les phénomènes de déséquilibre thermochimique.

On a présenté la méthode numérique qui s'agit de la méthode des différences finies permettant de résoudre le système d'équations différentielles. La discrétisation de ce système mène à un système d'équations algébriques non linéaires dont il faut résoudre efficacement, on a proposé deux méthodes, une s'agit de la méthode classique de substitutions successives et la deuxième étant la méthode de Newton appliquée aux systèmes d'équations et par conséquent il en résultera une suite de systèmes linéaires dont la résolution peut être accomplie numériquement ou analytiquement.

L'évolution de différentes grandeurs après résolution du problème dans la couche de choc fait l'objet de la première partie du chapitre 5.

## **CHAPITRE 4**

### **Simulation numérique d'un écoulement hypersonique bidimensionnel visqueux en déséquilibre chimique**

#### 4.1 Introduction

La simulation se définit comme l'utilisation ou la résolution de modèles correspondant à un système donné pour étudier le comportement de ce dernier dans un contexte précis. Elle est la suite logique de la modélisation qui est la première approche d'une simulation.

La modélisation et la simulation interviennent pour :

- La compréhension de la structure et des interactions à l'intérieur d'un système (détermination de rendement, estimation des performances...).
- L'étude du comportement du système par rapport à son environnement extérieur (consommation énergétique/coût...).

La conception de nouveaux dispositifs/ composants, étude de système (composant) avant la création de prototype et mise en œuvre de procédés nouveaux (stratégies et algorithmes de contrôle).

Les logiciels de simulation numérique des écoulements par des méthodes de volumes finis peuvent maintenant être considérés comme de véritables "expériences numériques" lorsque les simulations sont faites avec soin. L'avantage des méthodes numériques est que toutes les quantités physiques liées à l'écoulement (champs de vitesse, champs de pression, contraintes, ...) sont immédiatement disponibles. Dans une expérience, l'obtention de ces quantités en tous les points du champ est souvent impossible ou très difficile en pratique.

Ce chapitre porte sur la faisabilité d'utilisation d'un code de calcul numérique de dynamique des fluides pour simuler un écoulement hypersonique bidimensionnel en hors d'chimique autour d'un corps émoussé de type nez de navette spatiale. Dans cette contribution on a focalisé sur le comportement de l'écoulement réactif et les phénomènes physico-chimiques qui prennent naissance en aval de l'onde de choc intense qui apparaît en amont de l'obstacle, ainsi localiser l'onde de choc et étudier la couche de choc pour déterminer les champs de pression, de température et l'évolution des fractions massiques des espèces autour de l'obstacle. Le modèle mathématique est basé sur la résolution des équations de Navier Stokes pour un mélange gazeux réactif. Le logiciel ANSYS Fluent 14.5 est utilisé pour réaliser ce travail.



Nous présentons le logiciel de CFD retenu pour la modélisation, en particulier les modèles de turbulence utilisés. Le choix des conditions limites est également un point très important. Avant d'effectuer des simulations et présenter les principaux résultats, nous devons nous assurer de la validité du modèle. Pour cela, nous devons comparer les résultats de nos calculs avec des autres résultats obtenus par des autres auteurs. Une étude de sensibilité du modèle par rapport au maillage et aux modèles de turbulence va être effectuée.

## 4.2 Modélisation de Turbulence

### 4.2.1 Ecoulement turbulent

Les écoulements turbulents sont gouvernés par les équations de Navier-Stokes, comme pour le régime laminaire. Sauf qu'un écoulement turbulent se manifeste par des fluctuations de petites échelles dans le temps et l'espace; qui sont, dans l'état actuel des choses, n'ont pas de solution mathématique analytique connue. Comme en général on s'intéresse plutôt aux valeurs moyennes de la vitesse, pression ...etc., l'une des méthodes servant à éviter de résoudre directement les fluctuations turbulentes de petites échelles, en calcul numérique, est la méthode RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes equations).

### 4.2.2 Les modèles de turbulence

Les fluctuations de petites échelles dans le temps et l'espace dont on avait parlé, conduisent à l'adoption de méthodes particulières pour la résolution numérique des problèmes en mécanique des fluides.

La première des approches de modélisation est la méthode RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes equations) ou la moyenne de Reynolds des équations de Navier-Stokes, où les différentes variables d'état instantanées peuvent être décomposées en une composante moyenne et une composante fluctuante. Les équations moyennées résultantes comportent de nouveaux termes qui traduisent la production des fluctuations des vitesses et constituent le transfert d'un mouvement convectif dû aux fluctuations de la vitesse. Ces nouveaux termes sont appelés les contraintes de Reynolds ( $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ ). Celles-ci posent un problème de fermeture des équations gouvernantes, dont la solution actuelle passe par des "modèles de turbulence" souvent semi-empiriques.

#### 4.2.2.1 Hypothèse de Boussinesq

Après qu'il fût établi expérimentalement que les contraintes turbulentes augmentaient avec l'augmentation du taux de déformation moyen des éléments du fluide, Boussinesq proposa une relation entre les contraintes de Reynolds et les taux de déformation, qui a été étendue par la suite [36]:

$$\tau_{ij} = -\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (4-1)$$

$k$  étant l'énergie cinétique associée à la turbulence.

$\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$  et  $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$  (Delta de Kronecker).

$\mu_t$  est la viscosité dynamique turbulente.

Les modèles de turbulence conduisent à l'adoption d'équations de transport des quantités de la turbulence, pour résoudre la viscosité turbulente. De ce point de vue, on retrouve plusieurs catégories sous "Fluent":

- Modèle de turbulence à une équation de transport: Le modèle Spalart-Allmaras.
- Modèles de turbulence à deux équations: Le modèle  $k - \varepsilon$  Standard et ses variantes RNG et Realizable puis, les modèles  $k - \omega$  Standard et  $k - \omega$  SST.
- Modèle de turbulence à trois équations :  $k - kl - \omega$ .
- Modèle de turbulence à quatre équations : Transitions SST.
- Modèle de turbulence à 5 équations (7 équations en 3D): Le modèle RSM (Reynolds Stress Model)

#### 4.2.2.2 Modèle $k - \varepsilon$

Ce modèle met l'accent sur les mécanismes affectant l'énergie cinétique turbulente en se basant sur la modélisation de deux équations de transport. La première est celle de l'énergie cinétique turbulente ( $k$ ) et la deuxième est son taux de dissipation visqueuse ( $\varepsilon$ ) [35].

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (4-2)$$

Ainsi, la viscosité dynamique turbulente  $\mu_t$  est calculée par :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4-3)$$

La robustesse du modèle, ainsi que son économie en temps de résolution et une précision raisonnable pour une large gamme d'écoulements turbulents expliquent sa popularité pour les écoulements industriels et les simulations de transfert de chaleur. Néanmoins, ce modèle présente quelques faiblesses en présence de couches limites courbées, les écoulements tournants et tourbillonnaires, ainsi que les écoulements entièrement développés dans des conduites non circulaires [36].

#### 4.2.2.3 Modèle $k - \omega$

Ce modèle a été proposé par Wilcox en 1988 [12] et repose sur l'utilisation d'une échelle caractéristique des gros tourbillons,  $\omega = k/\varepsilon$ , et sur la même linéarité entre la viscosité turbulente et le cisaillement du champ moyen. La viscosité turbulente est donnée dans ce cas par la relation suivante :

$$\mu_T = \alpha \frac{\rho k}{\omega} \quad (4-4)$$

Où  $\alpha$  est un coefficient permettant de diminuer l'influence de la viscosité turbulente. Les équations de transport pour  $k$  et  $\omega$  sont respectivement [17] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega \end{aligned} \quad (4-5)$$

Dans ces deux équations de transport,  $G$  représente la génération d'énergie cinétique turbulente ou de la dissipation effective, selon l'indice utilisé, due au gradient de vitesse moyenne.  $\Gamma_k$  et  $\Gamma_\omega$  représentent la diffusivité effective de  $k$  et  $\omega$  respectivement.  $Y_k$  et  $Y_\omega$  représentent la dissipation de  $k$  et  $\omega$  par la turbulence.

Après plusieurs années de perfectionnement, ce modèle offre à présent un avantage pour la prédiction des écoulements cisailés libres. Il prend aussi en compte les effets des faibles nombres de Reynolds, de la compressibilité, des jets de différentes configurations [36].



### 4.3 Problème et Outils

#### 4.3.1 Description de problème

Notre objet principal dans ce travail est de réaliser une simulation des écoulements hypersonique bidimensionnelle, visqueux et en déséquilibre chimique autour d'un corps émoussé de type nez de navette spatiale. Nous avons par ailleurs fait l'hypothèse d'un écoulement chimique à l'équilibre vibrationnel, les phénomènes d'ionisation ont été négligés : pour des vitesses amont jusqu'à  $6000 \text{ m.s}^{-1}$  [25], le rayonnement ne devient important qu'à partir de  $8000 \text{ m.s}^{-1}$  [25], et ne pourra être étudié ici. L'air est donc considéré comme un mélange de cinq gaz parfaits ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $O$ ,  $N$ ) en déséquilibre chimique.

En premier lieu, le problème a été traité autour d'un corps arrondi simple « demi sphère », pour mieux comprendre le phénomène et maîtriser le code de calcul, puis, une tentative a été effectuée pour réaliser une simulation autour d'une double ellipse.

Le corps arrondi choisi pour la simulation était la sphère de « Lobb ». L'expérience de Lobb [29] réalisée sur un corps de type sphère-cône. Le rayon de la sphère est de  $R = 6.35 \text{ mm}$  et la longueur du cylindre est de  $1.3 \text{ m}$ . La pression et température amont valent respectivement  $664 \text{ Pa}$  et  $293 \text{ K}$ , le nombre de Mach étant de  $15.35$ . La température moyenne de la paroi est de  $1000 \text{ K}$ . La paroi est supposée non-catalytique [20].

#### 4.3.2 Le logiciel ANSYS Workbench

ANSYS est un logiciel de simulation numérique leader de son marché utilisé dans le développement de produits industriels. Il couvre toutes les étapes nécessaires à une simulation : le traitement géométrique, le maillage, la résolution, le traitement de résultats et l'optimisation. ANSYS offre une plateforme de calcul multi-physique intégrant la mécanique des fluides et des structures, l'électromagnétisme, la thermique ainsi que la simulation de systèmes et de circuits. Les utilisateurs ANSYS sont de domaines industriels très divers comme la construction de machines, les secteurs de l'énergie, l'automobile, le ferroviaire, l'aérospatial, le médical, la microtechnique, la micro-électronique...etc.

##### 4.3.2.1 Architecture du logiciel

Comme tout logiciel de CFD, il est composé de trois éléments : le préprocesseur, le solveur et le post-processeur.

- La définition du problème à résoudre s'effectue à l'aide du **préprocesseur**. Il permet de représenter la géométrie du système, de définir le type de conditions limites aux frontières du domaine, de spécifier le type de matériau (fluide ou solide). Il fournit aussi la possibilité de discrétiser le domaine, en proposant plusieurs algorithmes de maillage suivant sa géométrie.
- Le **solveur** permet de définir numériquement les conditions opératoires (gravité, pression) dans lesquelles est effectuée la simulation, ainsi que la spécification des conditions aux limites. Enfin, il permet de choisir le processus itératif, en proposant notamment plusieurs schémas numériques pour la discrétisation spatiale et temporelle, et pour le couplage de la vitesse et de la pression. Il offre également une interface permettant de contrôler à tout moment l'état d'avancement des calculs.
- Le **post-processeur** est l'élément qui permet de visualiser la géométrie et le maillage du domaine, mais surtout d'afficher les résultats obtenus. Il est ainsi possible de visualiser les champs du vecteur vitesse, les champs de pression, de turbulence ainsi que toutes les autres grandeurs calculées sur un segment, une section du domaine ou sur tout le volume. Il offre aussi la possibilité de tracer des courbes et de visualiser les lignes de courant ou la trajectoire de particules.

### 4.3.3 Création d'un système d'analyse « Fluid Flow »

Le WORKBENCH permet de créer une chaîne de calcul pour une simulation « *Analysis System* » et gérer automatiquement les interactions entre les différents logiciels utilisés pour la géométrie, le maillage, la simulation et le post-traitement. Pour notre cas, on crée un projet « Fluid Flow (Fluent) » à partir de la liste de « Analysis Systems ».

Le projet est composé de différentes cases associées à différentes étapes successives réalisées chacune avec un logiciel de la suite ANSYS. Lors de la phase de simulation, les étapes sont réalisées successivement. Si une étape connaît une modification (modification de la géométrie ou du maillage par exemple), les étapes suivantes devront être mises à jour conformément aux modifications. La figure 4.1) présente la fenêtre principale de Workbench à partir de laquelle on crée le projet, on choisissant le type de projet « Fluid Flow (Fluent) ». Ce type de projets utilise, pour chaque phase de simulation, les logiciels illustrés dans le tableau 4.1).

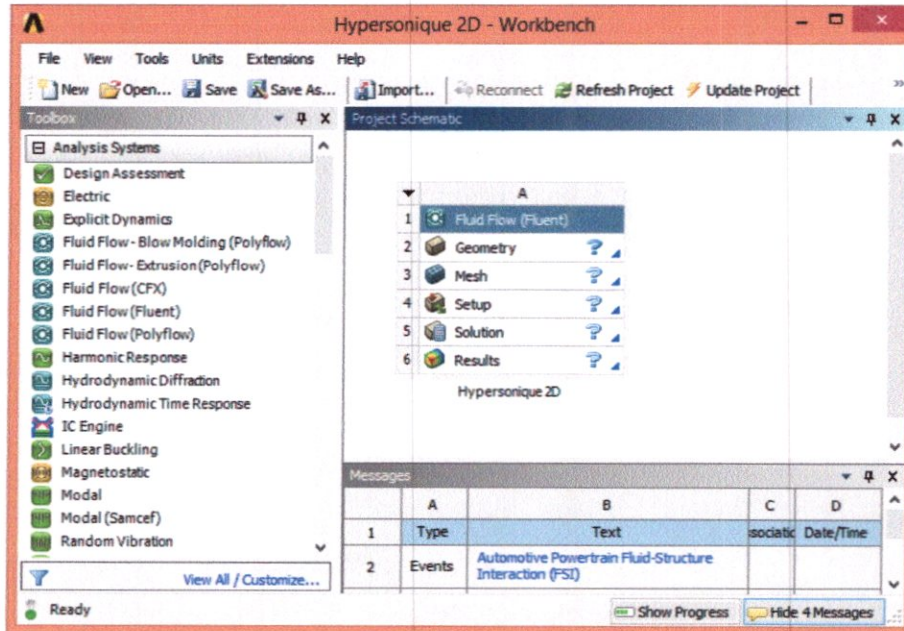


Figure 4.1 : Création de la simulation sous Workbench.

Tableau 4.1 : Les logiciels utilisés dans le projet "Fluid Flow"

2	Geometry	CAO « Création de la géométrie »	ANSYS DesignModeler
3	Mesh	Le Maillage	ANSYS Meshing
4	Setup	Mise en données et simulation	ANSYS Fluent
5	Solution	Résultats CFD	
6	Results	Post-traitement	CFD Post

#### 4.4 Création de la géométrie

Cette étape consiste à dessiner la géométrie du problème : le corps et le domaine de fluide environnant, avec le logiciel ANSYS DesignModeler.

##### 4.4.1 ANSYS DesignModeler

Le logiciel ANSYS DesignModeler permet de réaliser des tracés 2D (Sketch), de créer à partir des sketches des objets 3D (par extrusion ...etc.) et de manipuler les objets 3D. Dans notre cas, on va travailler en 2D dans le plan XY pour créer la géométrie du problème.



#### 4.4.2 Dessin « Sketch » et création du domaine de calcul

Notre géométrie est assez simple et sa création sous "DesignModeler" est facile. Pour dessiner notre domaine de calcul et la géométrie étudiée, le mode Sketching nous permet de réaliser des tracés « Sketch » dans le plan XY, en utilisant les différents outils disponibles pour dessiner. Après avoir dessiner la géométrie, l'étape suivante est de définir les dimensions, cette opération permettra par la suite de pouvoir modifier les dimensions du domaine ou bien la géométrie. À la fin, on obtient une géométrie et ses dimensions associées comme il représenté ci-dessus.

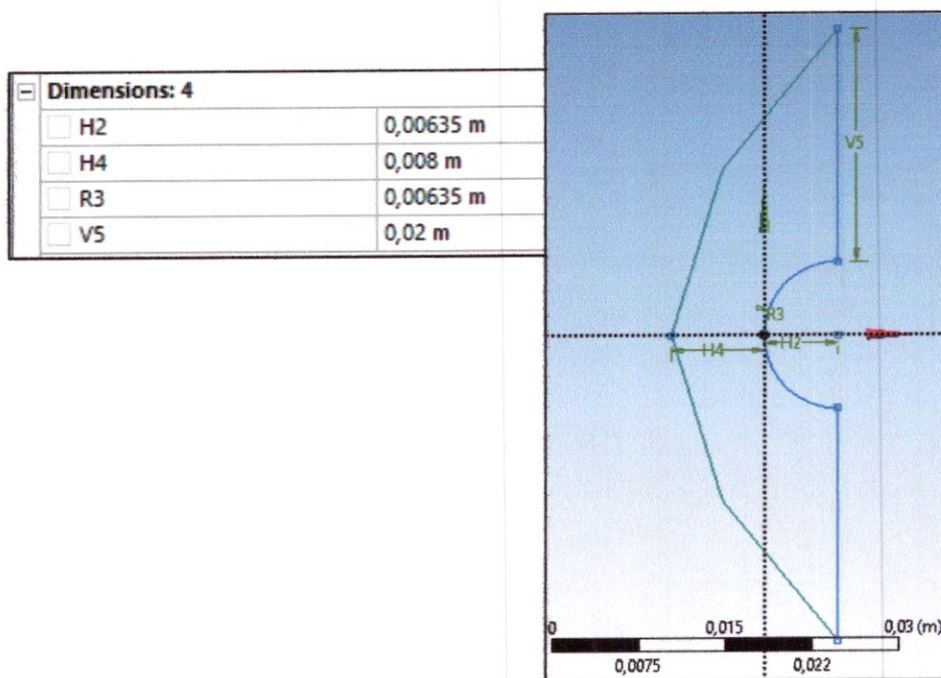


Figure 4.2 : Dimensionnement de la géométrie et le domaine.

Pour définir le domaine de calcul, Il faut maintenant créer une face à partir de notre Sketch, donc on utilise la fonction « surfaces from sketche » et ensuite on utilise la fonction « symmetry » qui nous permet de décomposer la géométrie de la face obtenue, la géométrie finale sera :

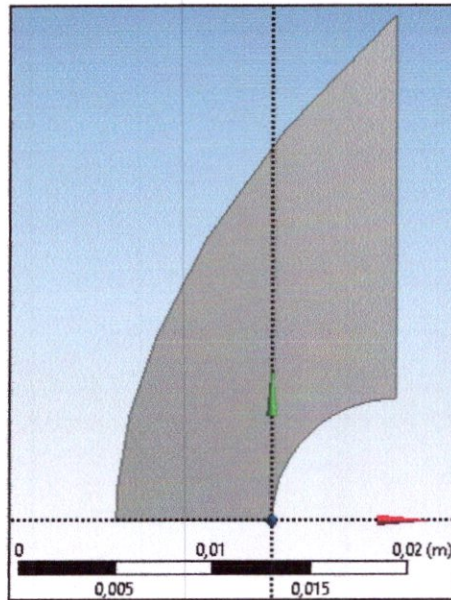


Figure 4.3 : La géométrie finale

La géométrie a été créée avec le fait que la simulation va être exécuté en utilisant les équations de Navier-Stocks axisymétrique, Par conséquent, une géométrie bidimensionnelle est créée, avec un axe défini au centre radial du corps étudié. Cette technique permet de diminuer le nombre de mailles utilisés et par conséquent de réduire le temps de calcul.

## 4.5 Maillage de domaine

### 4.5.1 Maillage

La création du maillage se fait sous le progiciel "ANSYS Meshing". Cependant, pour notre cas, deux choix principaux du maillage se sont posés à nous. En l'occurrence, un maillage soit à base de cellules quadrilatères, soit à base de cellules triangulaires (soit à base de cellules hexaédriques, soit à base de cellules tétraédriques, pour le cas 3D). L'utilisation d'un maillage triangulaire induirait un surplus du nombre de cellules par rapport aux cellules quadrilatères, d'où le besoin de plus de ressources et de temps de calcul. Cependant, notre géométrie est assez simple où l'écoulement suit pratiquement la forme de la géométrie. Donc, en utilisant un maillage à cellules quadrilatères, nous aurons un alignement de l'écoulement avec notre maillage, alors que ça ne sera jamais le cas avec des cellules triangulaires. Ce dernier point garantira un minimum de diffusion numérique. Par conséquent, le maillage structuré à cellules quadrilatères a été choisi.

#### 4.5.1.1 Techniques générales de génération du maillage

Pratiquement, il n'existe pas de règle précise pour la création d'un maillage valable, cependant il existe différentes approches qui permettent d'obtenir une grille acceptable.

Nous pouvons résumer ces règles ainsi :

- Maintenir une bonne **Qualité** des éléments
- Assurer une bonne **Résolution** dans les régions à fort gradient
- Assurer un bon **Lissage** dans les zones de transition entre les parties à maillage fin et les parties à maillage grossier
- Minimiser le nombre **Total** des éléments (temps de calcul raisonnable)

#### 4.5.2 Génération du maillage

La génération d'un maillage adapté à l'écoulement est une étape très importante dans la réalisation d'une simulation numérique. De sa qualité dépend la précision des calculs. Un nombre de mailles insuffisant fera diverger les calculs ou sera responsable d'une diffusion numérique trop importante. Il faut trouver un compromis entre le nombre de mailles et le temps de calcul qui augmente considérablement avec le raffinement de la discrétisation du domaine. Pour notre cas le phénomène de la création de l'onde de choc se fait au voisinage de la paroi où les gradients seront très importants, par conséquent, nous avons mené à utiliser un maillage initial un peu grossier et raffiné au voisinage de la paroi (figure 4.4) avec le fait que l'étude de sensibilité de maillage sera effectué dans Fluent.

Lors la génération du maillage on a essayé de respecter les caractéristiques suivantes :

- un domaine de calcul assez large pour éviter d'influence des conditions aux limites sur le résultat.
- un maillage fin au voisinage de l'objet où les phénomènes importants vont se produire.
- un maillage plus grossier loin de l'objet, où l'écoulement extérieur ne varie pas ou peu, afin d'économiser du temps de calcul.
- une transition « douce » entre les zones raffinées et non raffinées pour éviter les problèmes d'erreur numérique lors de la résolution.
- une bonne résolution au niveau de la couche limite.



- et enfin, un nombre pas trop important de mailles pour ne pas alourdir les temps de calcul.

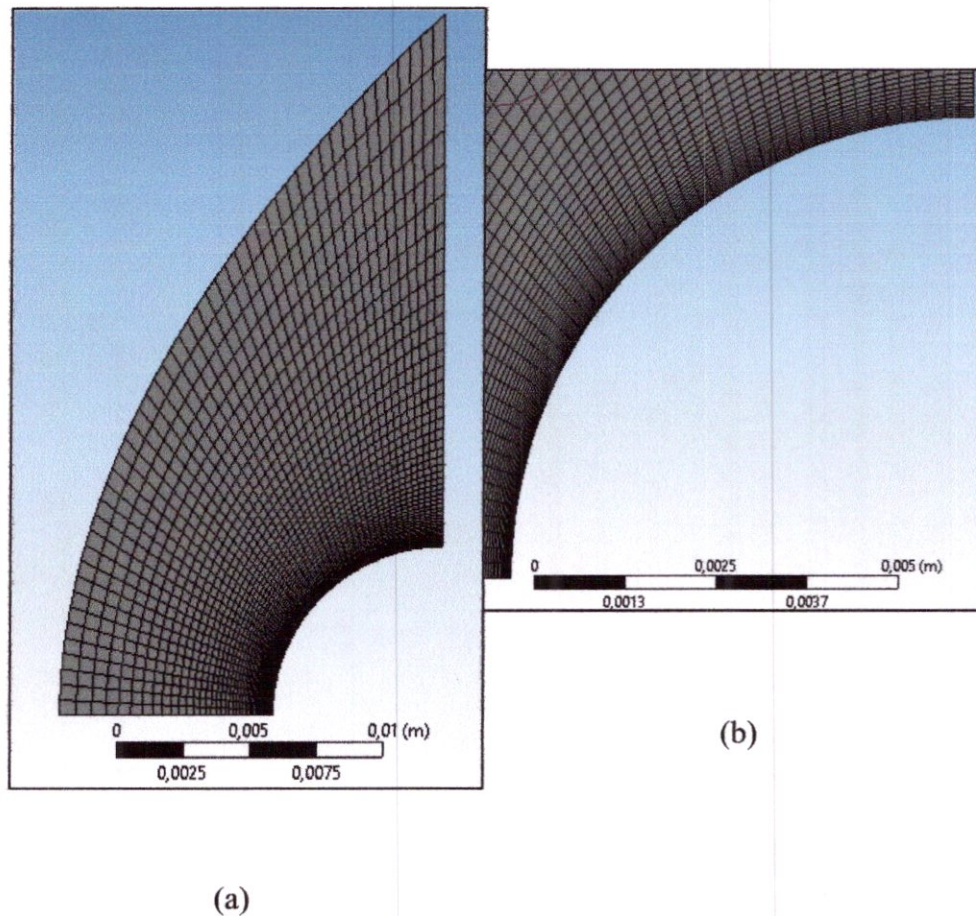


Figure 4.4 : (a) : Maillage initial, (b) agrandissement au voisinage de la sphère.

### 4.5.3 Repérage des conditions aux limites

La dernière étape consiste à identifier et à nommer les différentes parties de la géométrie afin de :

- définir les conditions aux limites du problème (entrées, sortie ...etc.),
- définir des conditions sur le maillage au niveau des différentes sélections

En 2D, pour repérer les entrées, sorties ...etc., il faut sélectionner les différents arrêtes « edges » de la géométrie. Le tableau (4.2) et la figure (4.5) illustrent les conditions aux limites de la géométrie.



Tableau 4.2 : Repérage des conditions aux limites

Entrée	Inlet_Flow
Sortie	Outlet_Flow
Corps	Body
Axe de symétrie	Axis_Symmetry

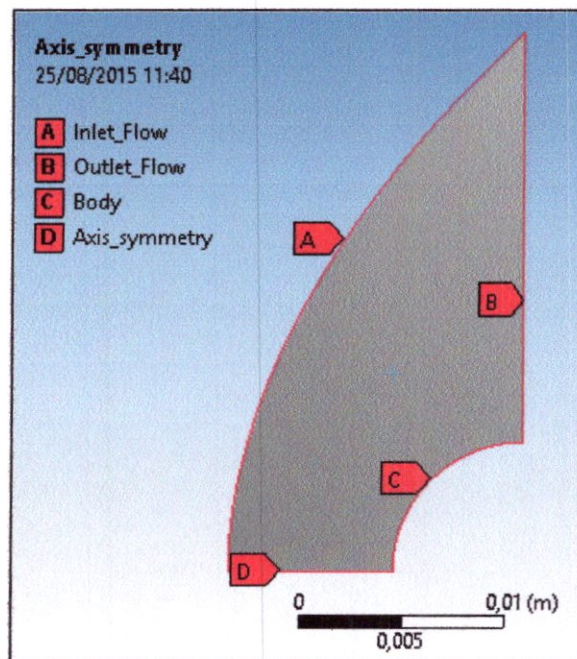


Figure 4.5 : Repérage des conditions aux limites

## 4.6 Mise en données et simulation

### 4.6.1 Présentation de Fluent

"Fluent" est un code de calcul pour modéliser les écoulements des fluides et les transferts thermiques dans des géométries complexes. Il peut résoudre des problèmes d'écoulement avec des mailles non structurées, qui peuvent être produites pour des géométries complexes, avec une facilité relative. Les types de mailles supportées sont des mailles, en 2D, triangulaires ou quadrilatérales, ou en 3D tétraédriques, hexaédriques, pyramidales, et les mailles (hybrides) mélangées. "Fluent" est écrit en langage de programmation C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de la mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter en tant que

plusieurs processus simultanés sur le même poste de travail ou sur des postes séparés, pour une exécution plus efficace.

"Fluent" s'utilise à travers une interface graphique. L'utilisateur avancé peut adapter ou augmenter aux besoins l'interface en écrivant des macros et des fonctions de menu, afin d'automatiser certaines procédures.

Ainsi, à titre non exhaustif, il a les capacités de modélisation suivantes:

- Ecoulements 2D ou 3D.
- Etats permanents ou transitoires.
- Ecoulements incompressibles ou compressibles incluant toute vitesse de régimes (subsoniques, transsoniques, supersoniques et hypersoniques).
- Ecoulements non visqueux, laminaires ou turbulents.
- Ecoulements Newtonien ou non.
- Transfert de chaleur forcé, par conduction, par convection ou radiatif.
- Les écoulements avec changements de phases.
- Ecoulements en milieu poreux.

Ce code de calcul emploie la méthode des volumes finis comme procédé de discrétisation. Les équations intégrales qui gouvernent l'écoulement, tels que l'équation de continuité, l'équation de conservation de la quantité de mouvement, celle de l'énergie ainsi que d'autres scalaires, comme la turbulence, sont résolues par cette méthode statistique. En utilisant cette technique basée sur un volume de contrôle, "Fluent" passe par les étapes suivantes:

- Division du domaine en volumes de contrôle discrets en utilisant une grille (maillage) de calcul.
- Intégration des équations gouvernantes sur les volumes de contrôle individuels, afin de construire les équations algébriques pour les variables discrètes dépendantes, (les inconnues), telles que les vitesses, pression, température ...
- Linéarisation des équations discrétisées et solution du système d'équations linéaires résultant, pour pouvoir mettre à jour les valeurs des variables dépendantes (inconnues).

#### 4.6.2 Chargement et vérification de Maillage

Cette opération est effectuée automatiquement car Fluent a été lancé depuis le Workbench. Le maillage apparaît dans la fenêtre de visualisation. Mais avant, il faut choisir le mode de calcul, "Fluent" offre deux modes de calcul: le mode "double précision" et le mode "simple précision".

Dans le mode "double précision", les nombres à virgule flottante sont représentés en utilisant 64 bits, alors que le mode "simple précision" utilise une représentation à 32 bits. Le revers de cette précision est que le premier mode requiert beaucoup plus de mémoire. En outre, Le mode "double précision" est préconisé, entre autres, pour les écoulements impliquant des longueurs d'échelles très disparates. Donc, c'est le mode que l'on va utiliser.

La première chose à faire dans Fluent est toujours de vérifier l'intégrité du maillage, c'est à dire qu'il est adapté à un calcul Fluent et ne présente pas de problèmes géométriques, et la qualité du maillage.

#### 4.6.3 Choix du solveur

Initialement, l'approche «pressure-based» a été développée pour les fluides incompressibles à faible vitesse tandis que l'approche «density-based» est orientée davantage vers les fluides compressibles à haute vitesse [36,37], par conséquent, le solveur « density based » a été choisi pour notre étude.

Le logiciel permet tout de même l'utilisation de l'une ou l'autre des méthodes pour un grand nombre de type et de vitesse de fluide. Dans les deux cas, le champ de vitesse est obtenu à partir des équations de mouvement. Dans l'approche « density-based », l'équation de continuité est utilisée pour obtenir le champ de densité tandis que le champ de pression est déterminé à partir de l'équation d'état. D'autre part, dans l'approche « pressure-based », le champ de pression est extrait en résolvant une équation de correction de la pression qui est obtenu par la manipulation des équations de continuité et de quantité de mouvement. Quel que soit le choix de la méthode, ANSYS Fluent va résoudre les équations qui gouvernent la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, et au besoin de l'énergie, ainsi que d'autres scalaires tels que la turbulence et les espèces chimiques.

Le solveur « density-based » résout les équations qui gouvernent la continuité, la quantité de mouvement, l'énergie ainsi que le transport des différentes espèces de façon

simultanée (ou couplée). Les équations qui gouvernent les autres scalaires sont résolues par la suite de manière séquentielle, c'est à dire distinctes les unes des autres (figure 4.6). Ces équations étant non-linéaires et couplées, plusieurs itérations de la boucle de solution doivent être effectuées avant qu'une solution convergée soit obtenue. Avec ce solveur « density-based », deux méthodes sont disponibles pour résoudre le système d'équations couplées: la formulation couplée explicite et la formulation couplée implicite. Les équations discrètes et non-linéaires gouvernantes sont linéarisées afin d'obtenir un système d'équations pour les variables dépendantes dans chacune des cellules de calcul. Le système linéaire obtenu est alors résolu pour créer une mise à jour de la solution du champ de fluide. La manière dont les équations gouvernantes sont linéarisées peut prendre une forme « implicite » ou « explicite » à l'égard de la variable dépendante (ou d'un ensemble de variables) d'intérêt.

- Méthode implicite : pour une variable donnée, la valeur inconnue dans chaque cellule est calculée en utilisant une relation incluant à la fois les valeurs existantes et inconnues des cellules voisines. Par conséquent, chaque inconnue apparaît dans plus d'une équation dans le système, et ces équations doivent être résolues simultanément afin de donner les quantités inconnues.
- Méthode explicite : pour une variable donnée, la valeur inconnue dans chaque cellule est calculée en utilisant une relation incluant uniquement les valeurs existantes. Par conséquent, chaque inconnue apparaît uniquement dans une seule équation du système et les équations pour la valeur inconnue de chaque cellule peuvent être résolues une à la fois afin de donner les quantités inconnues.

Dans la méthode de résolution « density-based », Fluent offre le choix d'utiliser une linéarisation implicite ou explicite des équations. Ce choix s'applique uniquement à l'ensemble couplé des équations qui gouvernent. Les équations de transport pour les scalaires supplémentaires sont résolues distinctement de l'ensemble couplé (comme la turbulence, rayonnement, etc.) et sont linéarisées puis résolues de manière implicite. Dans le cas où c'est la méthode implicite du solveur « density-based » qui est choisi, chaque équation de l'ensemble couplé d'équations qui gouvernent est linéarisé implicitement tout en respectant toutes les variables dépendantes de l'ensemble. Il en résulte alors un système d'équations linéaires de  $N$  équations pour chaque cellule dans le domaine, où  $N$  est le nombre d'équations couplées dans l'ensemble. Comme il y a  $N$  équations par cellule, ce système est parfois appelé

un système d'équations en « bloc ». En ce qui concerne le choix du solveur « density-based » explicite, chaque équation de l'ensemble couplé d'équations qui gouvernent est linéarisé explicitement. Tout comme dans l'option implicite, il en résulte un système de  $N$  équations pour chaque cellule dans le domaine et toutes les variables dépendantes dans l'ensemble seront mises à jour une à la fois. En résumé, une approche couplée implicite résout toutes les variables de toutes les cellules en même temps, alors qu'une approche explicite résout toutes variables une cellule à la fois.

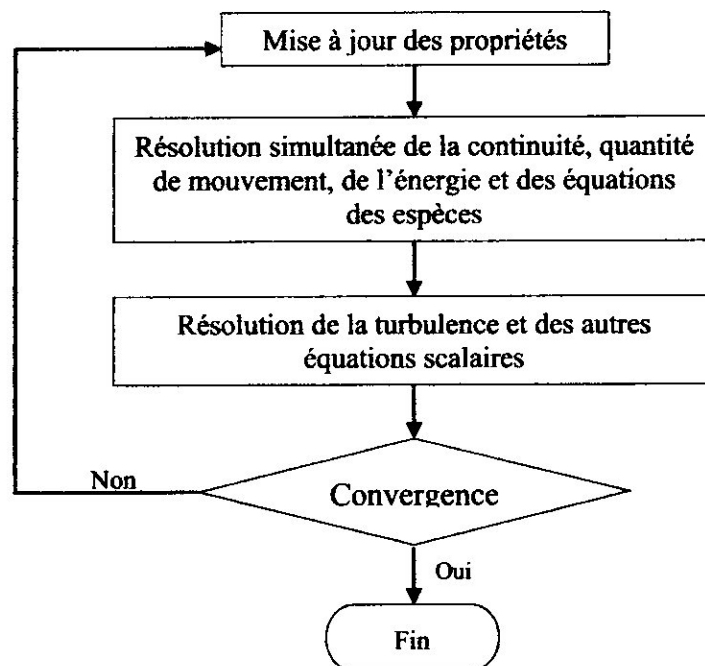


Figure 4.6 : Organigramme du solveur « density based » [36].

#### 4.6.4 Choix du modèle de turbulence

Les écoulements turbulents sont affectés de façon significative par la présence de parois. Au contact avec celles-ci, la vitesse du fluide est nulle. Au voisinage, la turbulence est fortement amortie et les phénomènes dus à la viscosité moléculaire y sont prépondérants. La turbulence augmente très rapidement lorsque l'on s'éloigne des parois. Certaines équations comme celles du modèle de turbulence  $k - \varepsilon$  ne sont plus valables près des parois car l'écoulement turbulent n'est pas pleinement établi. Une modélisation différente des phénomènes est alors nécessaire dans ce cas.

Deux approches différentes peuvent être utilisées sous Fluent :

- La première approche semi-empirique, utilise une fonction appelée « *Wall Function* ». Elle permet de relier le mur à la couche extérieure, pleinement turbulente. Ils existent trois options d'utilisation. La première « *Standard Wall Function* » est proposée par défaut par le code Fluent, la seconde « *Non – Equilibrium Function* » est particulièrement adaptée pour les écoulements complexes, soumis à de forts gradients de pression et la troisième « *Enhanced Wall Treatment* » qui tient le plus compte de l'effet de paroi.
- La deuxième approche consiste à modifier le modèle de turbulence choisi pour le rendre compatible avec l'écoulement aux parois en agissant sur sa configuration. Cette approche nécessite un raffinement du maillage au voisinage des parois.

Les premières simulations ont été réalisées avec le modèle de fermeture  $k - \varepsilon$  en tenant compte des effets de parois. Les résultats obtenus avec ce dernier seront également comparés, dans la suite de l'étude, avec celles du modèle  $k - \omega$ .

#### 4.6.5 Création de mélange « Propriétés de transport et réactions »

Selon les hypothèses imposées, l'air est considéré comme un mélange réactif, Fluent offre la possibilité de spécifier les différentes espèces du mélange, depuis sa base de données de on a créé un mélange réactif des espèces ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $O$ ,  $N$ ) et on le sauvegarde sous le nom « Air 5.scm », les réactions sont modélisés sous la forme suivante :



$M$  est le catalyseur qui peut être l'une quelconque des cinq espèces ( $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $O$ ,  $N$ ). Les effets de la fluctuation de la turbulence sont ignorées et la cinétique de la réaction est déterminée par la loi d'Arrhenius, dans Fluent et pour les réactions réversibles le taux de production molaire de l'espèce  $s$  de la réaction  $r$  est donné par :



$$R_{s,r} = \Gamma(\nu_{s,r}^* - \nu_{s,r}^i) \left[ k_{d,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{s,r}^i} - k_{i,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{s,r}^*} \right] \quad (4-7)$$

Le terme  $\Gamma$  représente l'effet net des éléments-tiers sur la vitesse de réaction, et son expression est donnée par:

$$\Gamma = \sum_{s=1}^5 \gamma_{s,r} [A_s] \quad (4-8)$$

Où,  $\gamma_{s,r}$  est l'efficacité de l'élément-tiers (Third body efficiency) ou catalyseur  $s$  dans la réaction  $r$ . la constante de vitesse directe est calculée par la loi d'Arrhenius (Equation 2-50), Les constantes  $C_r$ ,  $n_r$  et les températures de dissociation  $\theta_{d,r}$  (ou d'activation) pour chaque réaction utilisés sont données par Park « modèle de Park »[24] en Appendice C. Les valeurs de  $\gamma_{s,r}$  sont données en appendice D. Concernant les propriétés des espèces, les chaleurs spécifiques à pression constante, pour chaque espèce,  $C_p$  sont été calculées en utilisant une fonction des fonctions polynomiales « piecewise-polynomial functions », les coefficients de ces polynômes sont considérés par défaut en Fluent, Nous avons donné ces valeurs dans l'appendice D. La conductivité thermique et la viscosité dynamique sont calculées en utilisant la théorie cinétique des gaz « kinetic theory ». La théorie cinétique des gaz explique le comportement macroscopique d'un gaz à partir des caractéristiques des mouvements des particules qui le composent. L'expression de la viscosité est donné par [26,36] :

$$\mu = 2.67 \cdot 10^{-6} \frac{\sqrt{M_s T}}{\sigma^2 \Omega_\mu} \quad (4-9)$$

Où

$$\Omega_\mu = \Omega_\mu \left( \frac{T}{\varepsilon_0 / k_B} \right) \quad (4-10)$$



Tel que  $\sigma$ ,  $\Omega_\mu$  sont respectivement la section de collision et l'intégrale réduite de collision, les  $\sigma$  et  $\varepsilon_0/k_B$  représentent les paramètres de Lennard-Jonnes [26] et sont donnés dans l'Appendice D. Et l'expression de la conductivité thermique est donné par [26,36]:

$$k_{th} = \frac{15}{4} \frac{R}{M_s} \mu \left[ \frac{4}{15} \frac{C_p M_s}{R} + \frac{1}{3} \right] \quad (4-11)$$

Et qui ce concerne les propriétés de mélange, la densité est calculé par la loi de gaz parfait, et pour la chaleur spécifique, la viscosité et la conductivité thermique sont calculés en utilisant la loi de mélange « mixing-law », et le calcul de la diffusion de mélange a été fait en utilisant la théorie cinétique des gaz.

#### 4.6.6 Les conditions aux limites

En plus d'un maillage adéquat, les conditions aux limites sont très importantes pour obtenir une solution précise avec une convergence rapide. Le logiciel « Fluent » offre la possibilité de changer le type de conditions aux limites et de régler les données suivant nos besoins.

Les conditions aux limites de notre problème sont définies sur le code Fluent comme suit : pour la condition d'entrée « Inlet\_Flow » on a choisi « Pressur far-field » car le nombre de Mach, la pression et la température à l'entrée sont donnés, la composition massique de mélange à l'entrée est 76.7% de  $N_2$  et 23.3% de  $O_2$ . La deuxième condition « *pressure-outlet* » est appliquée au niveau de sortie « Outlet\_Flow », dans notre cas la condition ne requiert aucune spécification car l'écoulement est supersonique à la sortie, toutes les quantités d'écoulement sont extrapolées de l'intérieur [36]. La troisième condition « *wall* » est une condition de flux nul, elle est appliquée au niveau de la paroi « Body », la température de la paroi est considéré fixe est égale à 1000K, la vitesse est tangente à la paroi pour les cellules du voisinage. Finalement la condition « axis » a été appliquée au niveau de l'axe de symétrie « Axis\_Symmetry », généralement cette condition ne requiert aucune spécification.

#### 4.6.7 Initialisation

Pour obtenir une solution la plus exacte possible, le solveur de Fluent procède par itérations successives pour résoudre le système matriciel obtenu par discrétisation des équations par une méthode de volumes finis.

La procédure d'itérations nécessite que toutes les variables soient initialisées avant le démarrage du calcul. Une initialisation améliore la stabilité et la vitesse de convergence. Dans certain cas, une solution initiale correcte est nécessaire [37]. Pour notre calcul On a fixé un champ de vitesse égal à la vitesse d'entrée dans tout le domaine comme point de départ des itérations.

Le solveur part de la solution initiale et grâce à un algorithme itératif de résolution du système matriciel obtenu par discrétisation, va effectuer des itérations. Si tout se passe bien, chaque itération doit modifier la solution courante pour la remplacer par une solution plus proche de la solution exacte recherchée. A chaque itération et pour chaque équations une erreur, nommée résidu, est calculé par rapport à une solution exacte du système. Un calcul diverge si les résidus augmentent au cours des itérations.

#### 4.6.8 Convergence

A la convergence, toutes les équations de conservation discrétisées (quantité de mouvement, énergie,... etc.), se conforment dans chaque cellule à une tolérance spécifiée, et la solution ne change plus avec le temps.

Le Suivi de la convergence se fait avec les résidus. En général, une décroissance d'un ordre  $10^{-3}$  en magnitude des résidus indique une convergence au moins qualitative et les caractéristiques principales de l'écoulement sont établies [37].

**Remarque :** Les résidus sont calculés à partir des corrections dans les variables du problème entre la présente itération et l'itération précédente. Dans la plupart des cas, le critère de convergence par défaut dans Fluent « residual » est suffisant. La solution converge quand les résidus atteignent  $10^{-3}$ . Toutefois, dans certains cas il faut pousser les calculs à  $10^{-4}$  ou  $10^{-6}$ . Il n'y a pas de règle universelle [37].

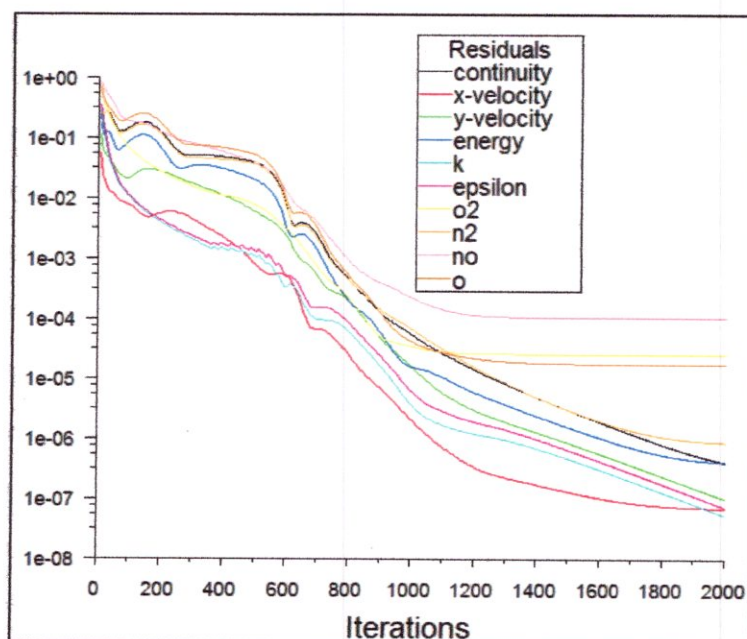


Figure 4.7 : Les résidus.

#### 4.6.8.1 Stabilité

Des instabilités numériques peuvent apparaître avec un problème mal posé, un mauvais maillage et/ou un mauvais réglage du solveur. Cela est détecté par des résidus qui augmentent ou restent « bloqué », indiquant une divergence des résidus. C'est-à-dire qu'il y a un déséquilibre dans les équations de conservation.

Les solutions possibles pour remédier ce problème sont [37]:

- Vérifier que le problème est bien posé.
- Calculer une première solution avec un schéma à l'ordre 1.
- Diminuer la sous-relaxation pour les équations ayant des problèmes de convergence
- Réduire le nombre de Courant.
- Remailler ou raffiner le maillage.

#### 4.6.8.2 Facteurs de relaxation

Afin de contrôler et réduire le changement produit durant chaque itération d'une variable de l'écoulement  $\phi$ , "Fluent" permet d'agir sur les facteurs de relaxation assignés à un nombre de variables comme suit [37]:

$$\begin{cases} \phi = \phi_{old} + \alpha \cdot \Delta\phi \\ \Delta\phi = \phi_{comp} - \phi_{old} \end{cases} \quad (4-12)$$

Où:  $\phi_{old}$  Ancienne valeur de  $\phi$

$\Delta\phi$  Changement dans la valeur de  $\phi$

$\phi_{comp}$  Valeur calculée de  $\phi$

$\alpha$  Facteur de relaxation.

Le code de calcul offre les meilleures valeurs des facteurs de relaxation pour une large gamme d'écoulements. Néanmoins, si on voit qu'au cours du calcul les résidus commencent à s'amplifier, il est préférable de réduire ces derniers. Par contre, si on observe une convergence très lente mais sûre là, on pourra les augmenter prudemment [37,36].

#### 4.7 Conclusion

Notre objet principal dans ce chapitre était de réaliser une simulation d'un écoulement hypersonique en déséquilibre chimique sous l'environnement ANSYS, Dans un premier temps, nous avons présentés le logiciel de simulation utilisé (la suite des logiciel ANSYS), la géométrie étudiée, le maillage ainsi les modèles de turbulence utilisés, en spécifiant les principales étapes suivies sous le code de calcul Fluent. Il est à noter que les méthodes de la solution numérique citées auparavant par exemple la stabilité, la convergence sont toutes contrôlées et vérifiées durant nos simulations faites. Dans le chapitre suivant et dans la deuxième partie, nous allons présenter les dernières étapes de notre processus CFD, c'est-à-dire l'étude de la sensibilité au maillage et aux modèles de turbulence ainsi que les divers résultats obtenus lors de la simulation de l'écoulement autour de la sphère de Lobb et la double ellipse, en les validant par comparaison avec la littérature scientifique.

# **CHAPITRE 5**

## **Résultats et commentaires**

## 5.1 Introduction

Dans ce présent chapitre on présente les différents résultats des deux études. Donc ce chapitre est subdivisé principalement en deux parties. La première partie est consacrée à la présentation des résultats de l'étude 1-D faite en chapitre 3, cependant la deuxième partie est consacrée à la présentation des résultats de la deuxième étude 2-D envisagée dans le chapitre 4.

## 5.2 Résultats de l'étude 1-D

A l'aval d'une onde de choc, pour les deux conditions considérés H3 et H4 (cf. Tableau (3.1), chapitre 3), on obtient pour le cas de l'air dissocié sans et avec couplage chimie-vibration, l'évolution de la température de translation-rotation, de la température de vibration pour les molécules en vibration : l'oxygène, l'azote et l'oxyde nitrique, de la composition du mélange ainsi des autres grandeurs ; la pression, la masse volumique et la vitesse.

### 5.2.1 Evolution de la température le long de la plage de relaxation

Sur les figure (5.1) et figure (5.2) sont représentées respectivement à  $M = 16.3$  et  $M = 19$  l'évolution de la température de translation-rotation et les températures de vibration des molécules constituant le mélange d'air le long de la plage de relaxation. Pour les deux points, on remarque d'une part, une diminution substantielle de la température de translation-rotation, d'autre part, une augmentation rapide des températures de vibration  $T_{v_{O_2}}$ ,  $T_{v_{NO}}$  et  $T_{v_{N_2}}$  juste après l'onde de choc, puis elles diminuent lentement pour rejoindre l'équilibre. Par exemple pour le point H3, à Mach 19, la température de translation-rotation initiale (juste après le choc) avoisine les 16700 K, au début elle diminue très rapidement où à  $x = 3$  cm elle chute de 62.5%. Concernant les températures de vibration des molécules, au départ leurs valeurs initiales égalent à la température avant le choc (à l'infini amont). Après le choc, elles augmentent au début rapidement pour atteindre le maximum. L'oxygène moléculaire s'excite, comme prévu, plus rapidement que l'oxyde nitrique et l'azote, ceci est dû au fait que la température caractéristique de vibration de l'oxygène est inférieure aux celles des deux autres molécules qui nécessitent, relativement, beaucoup d'énergie pour se dissocier ; notamment l'azote, car il se trouve initialement avec un taux élevé dans la composition chimique de l'air (fraction massique initiale  $\approx 77\%$  ).

On remarque aussi, que les grandeurs caractéristiques de relaxation de vibration sont différentes suivant les conditions en amont. A Mach 16.3, on constate une relaxation de 9 cm ; alors que cette relaxation s'effectue sur 7 cm à Mach 19, Ceci est la conséquence de la moindre

efficacité du transfert T-V (translation-vibration) à Mach 16.3 par rapport à celui à Mach 19 . On peut dire que les échanges T-V deviennent de plus en plus efficaces lorsque le nombre de Mach croit.

### 5.2.2 Evolution des fractions massiques des espèces le long de la plage de relaxation

Sur la figure (5.3) et la figure (5.4), on a représenté l'évolution des fractions massiques des cinq espèces en fonction de la plage de relaxation pour les deux conditions considérées H4 et H3 respectivement. On peut ainsi remarquer que la dissociation de  $N_2$  est plus marquée à Mach 19 qu'à Mach 16.3 où à Mach 16.3 et à l'équilibre elle représente 68% de la composition massique du mélange d'air, cependant à Mach 19 elle représente 59%. On remarque également que la dissociation de l'oxygène moléculaire  $O_2$  s'effectue sur une très courte distance relativement à la plage de la relaxation, il se dissocie pour former principalement les atomes d'oxygène  $O$ , ceci est constaté clairement sur les deux graphes où l'atome d'oxygène se forme très rapidement. Concernant la formation de l'atome  $N$  il se trouve à l'équilibre en pourcentage d'environ 17% de la masse du mélange à Mach 19 tandis qu'il constitue environ 8% de la composition massique du mélange à Mach 16.3. Les courbes de fraction massique de la molécule  $NO$  présentent un maximum où elle atteint 3.8% à Mach 16.3 et 1.8% à Mach 19 puis elle se dissocie au fur et à mesure.

### 5.2.3 Evolution de la vitesse, la masse volumique et la pression

Les évolutions de la vitesse, la masse volumique et la pression pour les deux points considérés le long de la plage de relaxation sont représentées sur les figures de (5.5) à (5.10) .

Ces grandeurs présentent des profils semblables à Mach 16.3 et à Mach 19. Nous présentons par exemple ces différentes évolutions à Mach 16.3 .

D'abord sur la figure (5.5) on remarque une diminution monotone de la vitesse le long de la plage de relaxation, cette diminution est plus accentuée dans la zone  $0 < x < 1$  cm où elle chute de 43% de sa valeur initiale qui vaut environ 870 (m/s). Puis elle commence à se diminuer lentement jusqu'à atteindre une valeur fixe d'environ 410 (m/s).

Concernant la masse volumique, nous montrons son évolution sur la figure (5.7) et (5.8) pour les deux nombres de Mach 16.3 et 19 respectivement où elle présente de profil similaire dans les deux cas. Par exemple, pour le nombre de Mach 16.3, la masse volumique passe de la valeur 0.001583 ( $\text{kg/m}^3$ ) pour atteindre la valeur 0.003351 ( $\text{kg/m}^3$ ) à l'équilibre ( $x = 9$  cm).



Concernant la pression du mélange, représentée sur les figures (5.9) et (5.10). Elle, par exemple à Mach 16.3, passe par la valeur 5880 pour atteindre 6513 (Pa) à l'équilibre.

#### 5.2.4 L'effet de couplage chimie-vibration

Pour montrer l'influence du couplage chimie-vibration, on a tracé l'évolution des grandeurs principales le long de la plage de relaxation sans et avec le couplage. On a choisi de travailler avec le modèle de Park du fait de sa simplicité.

Sur la figure (5.11), l'évolution de la température trans-rotation le long de la plage de relaxation est montrée avec et sans couplage, on remarque que la diminution de la température est moins vite dans le cas avec couplage.

Sur les figures allant de (5.12) à (5.14), on a représenté les températures de vibration des molécules  $O_2$ ,  $N_2$  et  $NO$  respectivement. Ces trois graphes sont caractérisés par une particularité commune ; où on voit que les températures de vibrations augmentent lors de la prise en compte du couplage CVD.

Sur la figure (5.15), on a tracé l'évolution des fractions massiques des espèces avec la prise en considération du couplage chimie vibration. La différence majeure entre ce cas et le cas sans couplage est constaté au début, on voit un retard sur la dissociation des espèces où il apparait clairement pour le  $N_2$ . Ceci peut être facilement justifié, car, plus l'état vibratoire d'une molécule est excité, plus elle a tendance à se dissocier. La température de vibration a donc une influence sur la réactivité d'une molécule : si la température de vibration est plus grande que la température de trans-rotation, toutes les réactions qui entraînent sa dissociation sont alors favorisées, au contraire, si la température de vibration est plus petite que la température de trans-rotation, la dissociation est ralentie. Au début la température de vibration de  $N_2$  croit rapidement mais se trouve faible ( $x \leq 1$  mm), cette distance correspond exactement à la distance sur la figure (15.3) où le  $N_2$  se trouve très faiblement dissocié (distance de retard)



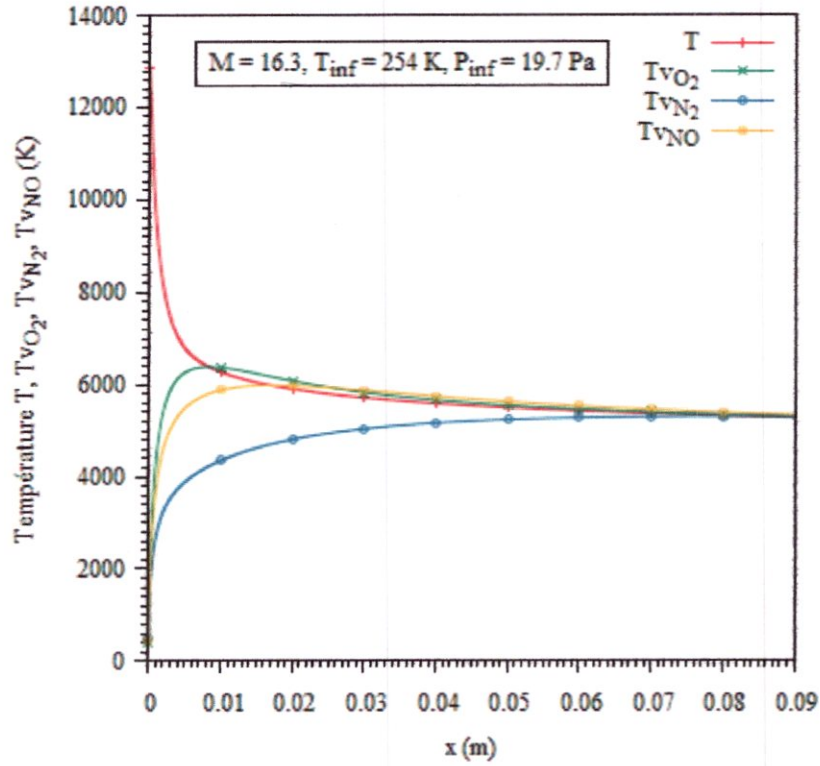


Figure 5.1 : Évolution des températures de trans-rotation et vibration de  $O_2$ ,  $N_2$  et  $NO$  pour un nombre de Mach amont  $M = 16.3$ .

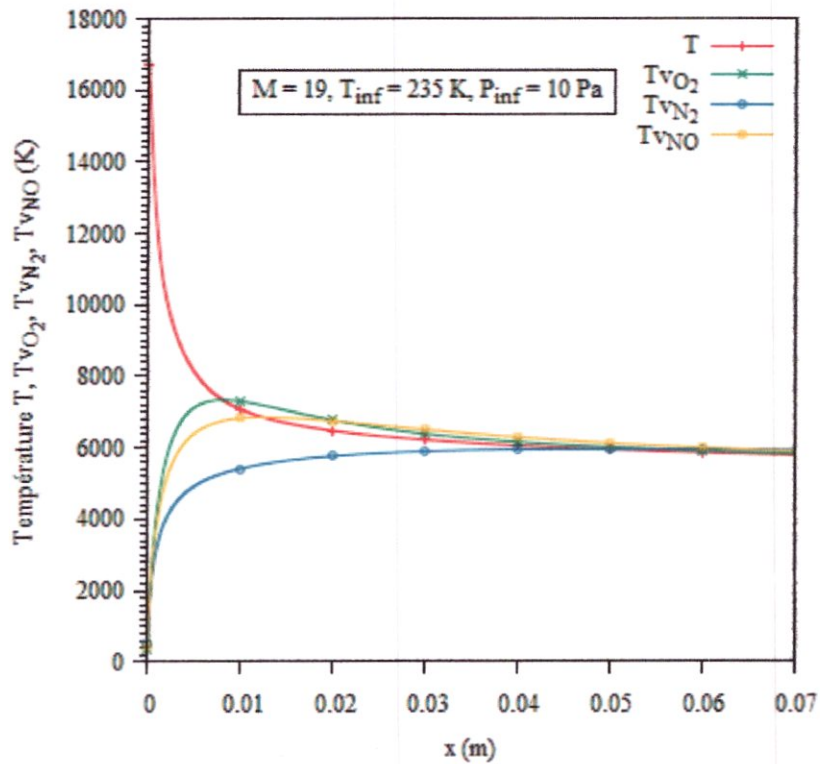


Figure 5.2 : Évolution des températures de trans-rotation et vibration de  $O_2$ ,  $N_2$  et  $NO$  pour un nombre de Mach amont  $M = 19$ .

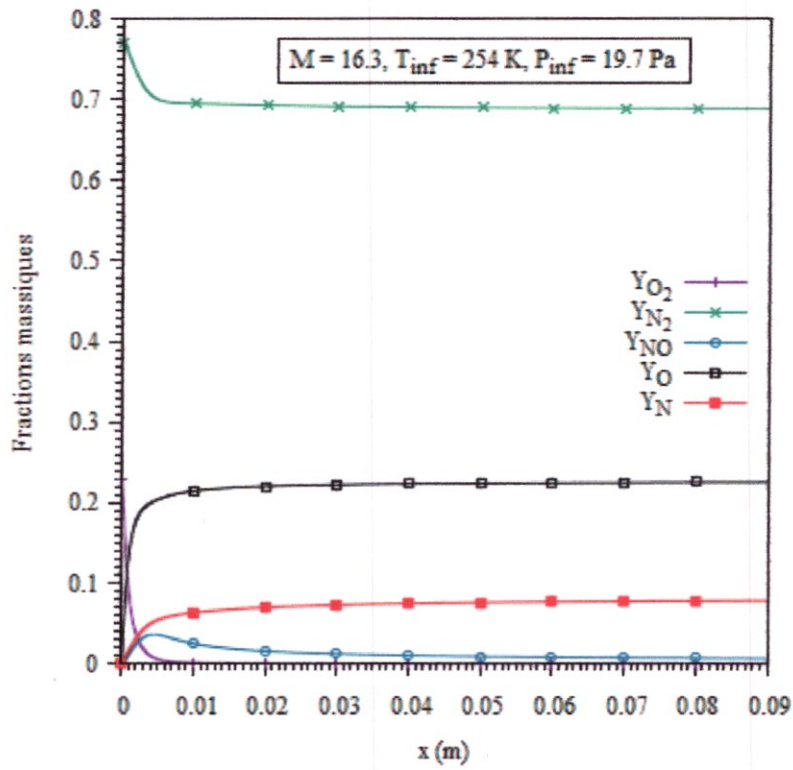


Figure 5.3 : Évolution des fractions molaire des espèces pour un nombre de Mach amont  $M = 16.3$ .

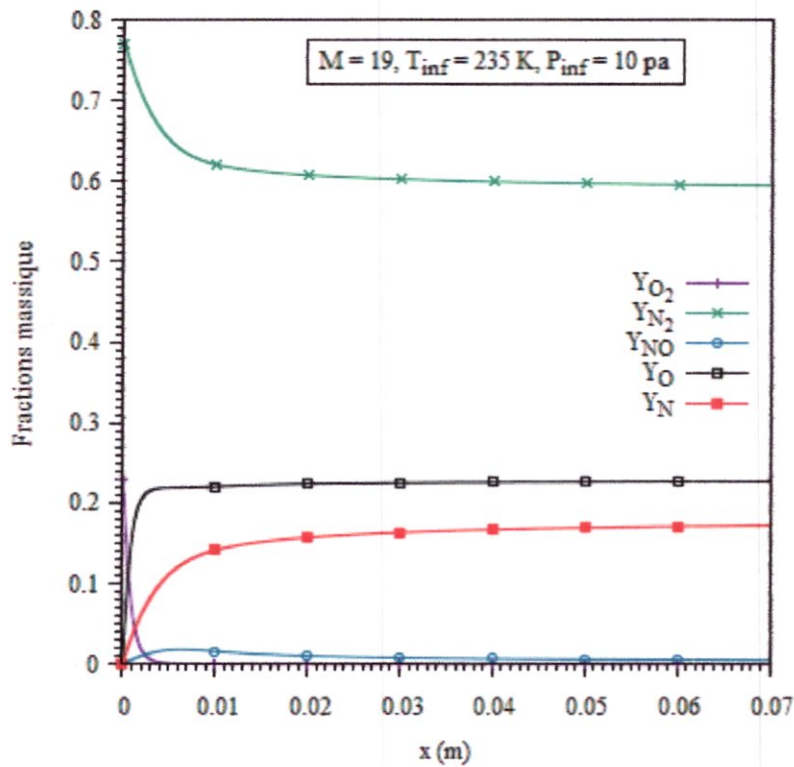


Figure 5.4 : Évolution des fractions molaire des espèces pour un nombre de Mach amont  $M = 19$ .

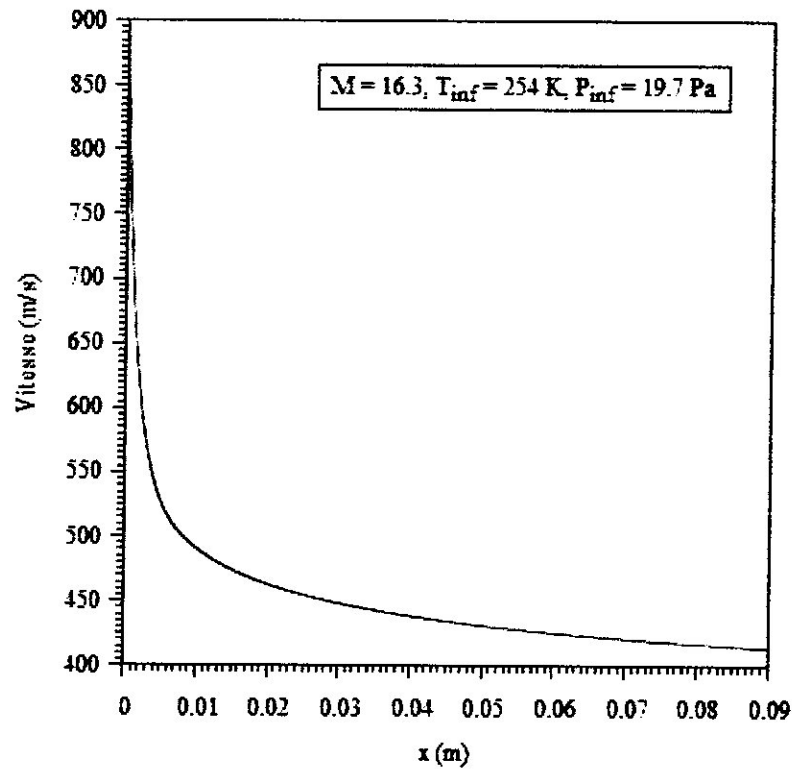


Figure 5.5 : Évolution de la vitesse pour un nombre de Mach amont  $M = 16.3$ .

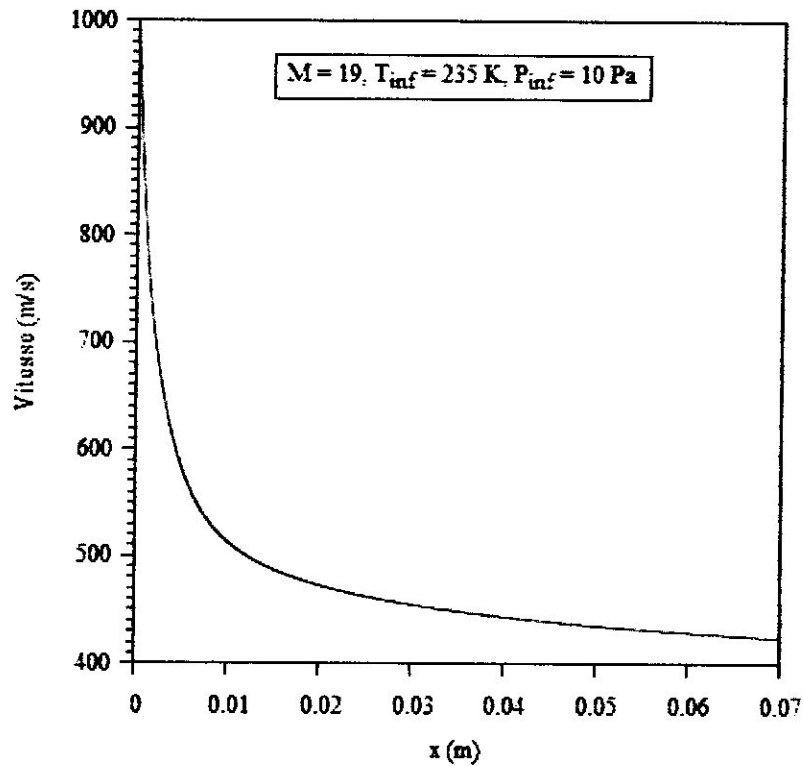


Figure 5.6 : Évolution de la vitesse pour un nombre de Mach amont  $M = 19$ .

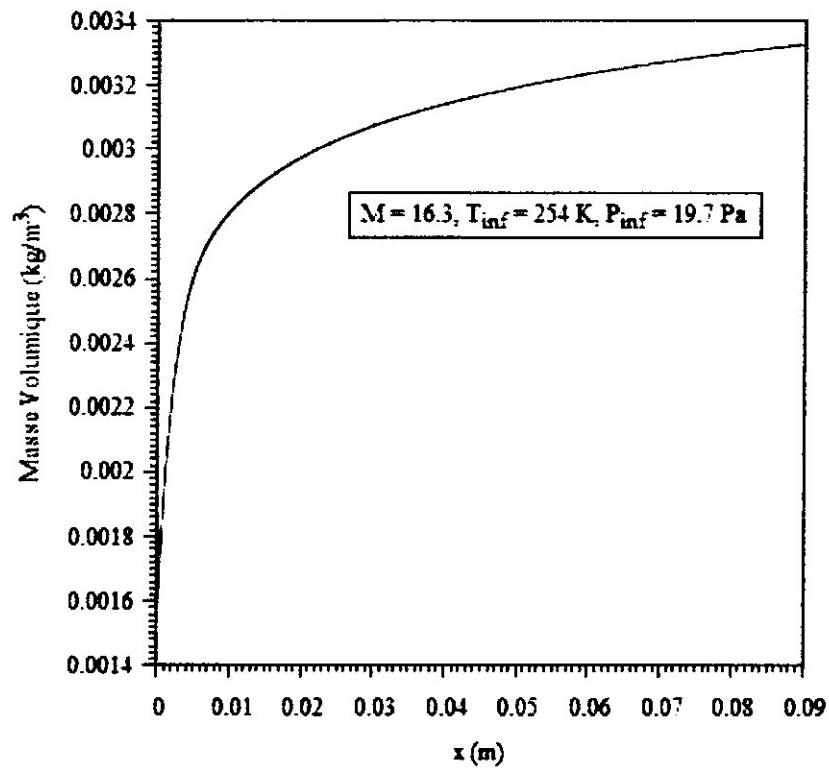


Figure 5.7 : Évolution de la masse volumique pour un nombre de Mach amont  $M = 16.3$ .

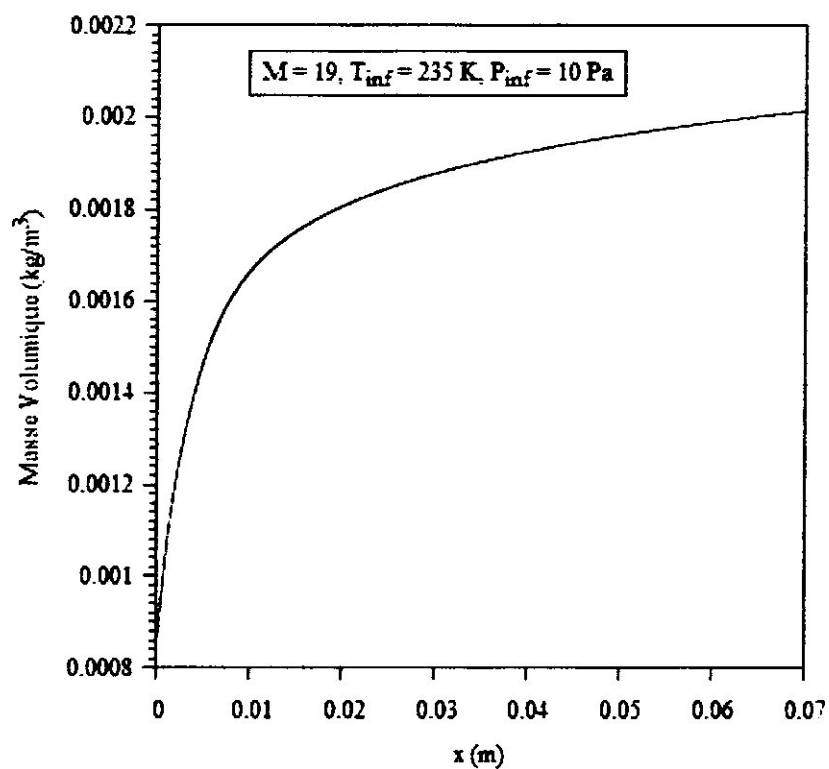


Figure 5.8 : Évolution de la masse volumique pour un nombre de Mach amont  $M = 19$ .

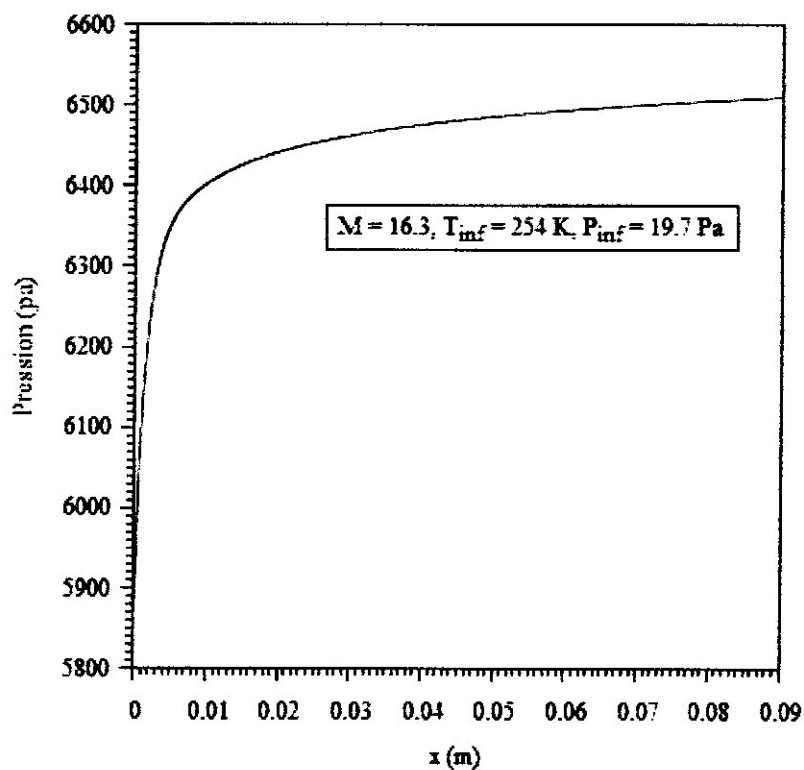


Figure 5.9 : Évolution de la pression pour un nombre de Mach amont  $M = 16.3$ .

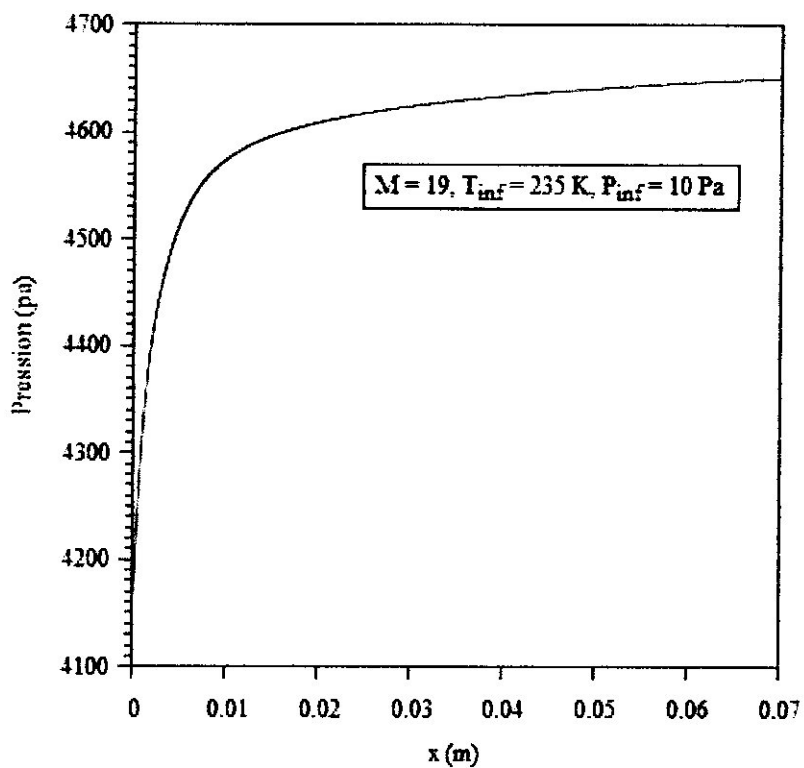


Figure 5.10 : Évolution de la pression pour un nombre de Mach amont  $M = 19$ .

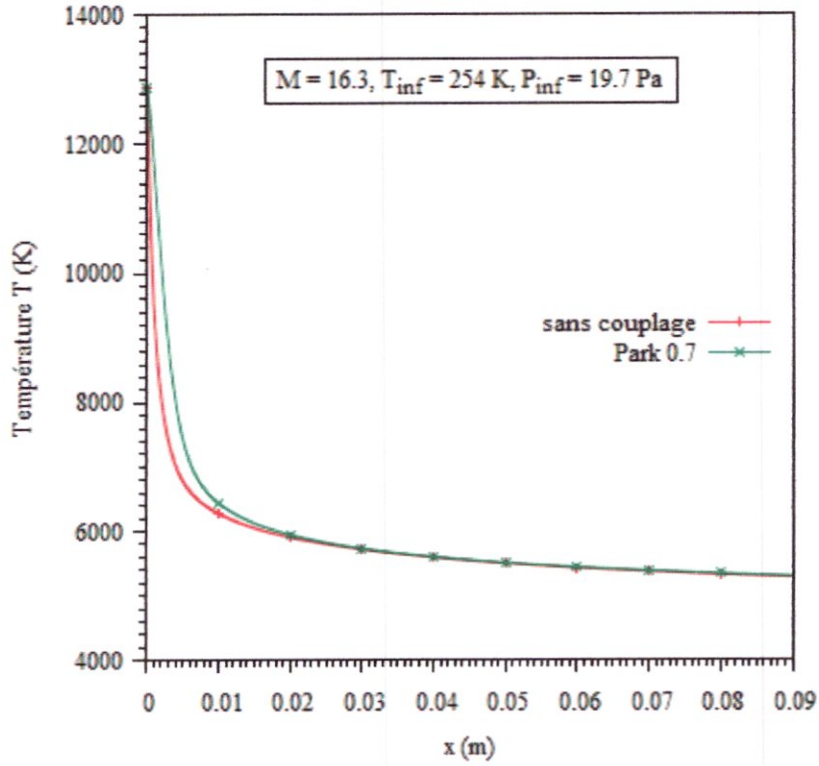


Figure 5.11 : Comparaison de la température de trans-rotation sans et avec couplage de Park ( $q = 0.7$ ) à  $M = 16.3$ .

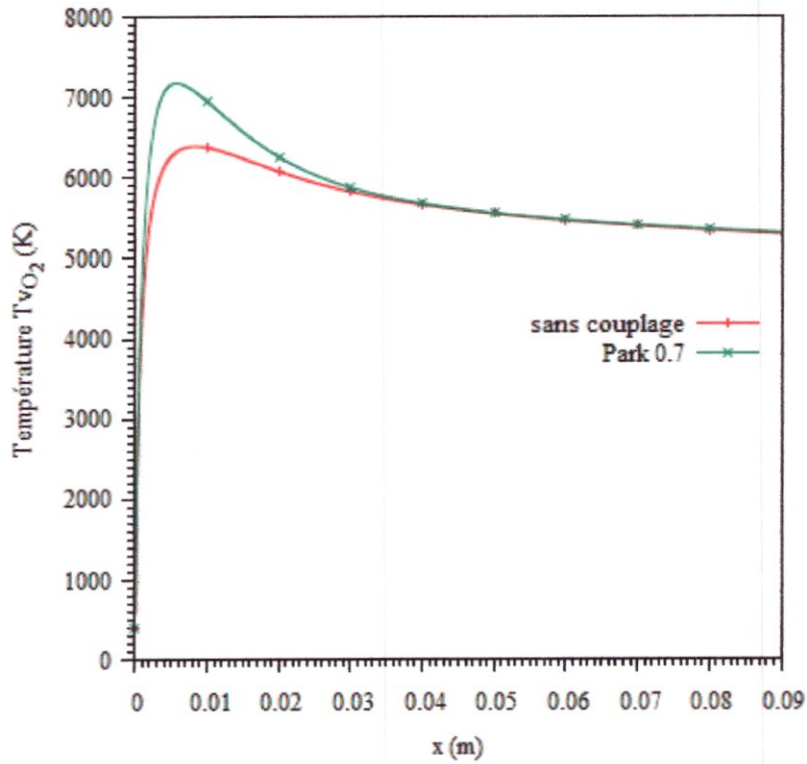


Figure 5.12 : Comparaison de la température de vibration de  $O_2$  sans et avec couplage de Park  $M = 16.3$ .

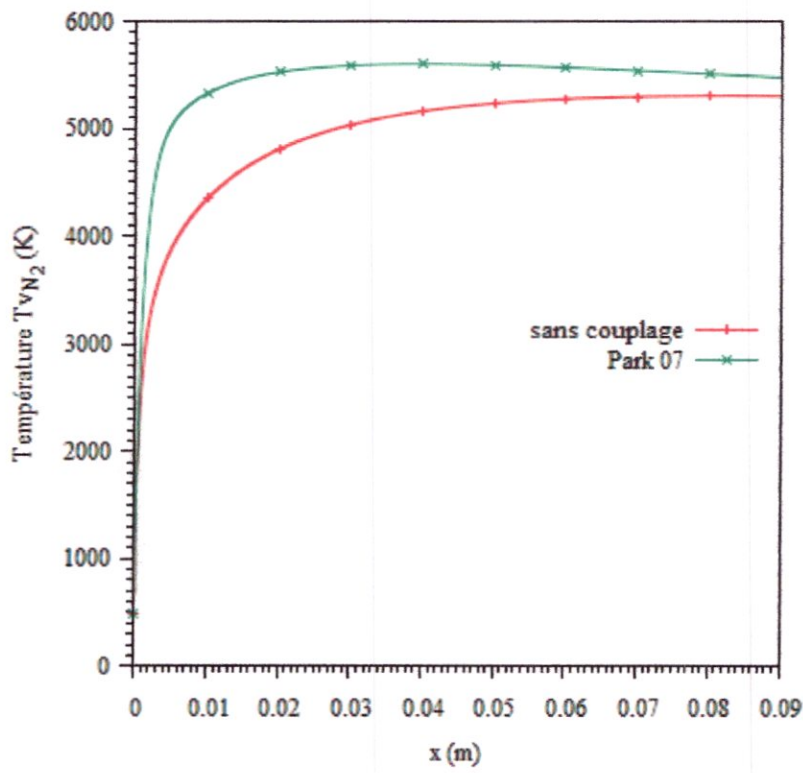


Figure 5.13 : Comparaison de la température de vibration de  $N_2$  sans et avec couplage de Park à  $M = 16.3$ .

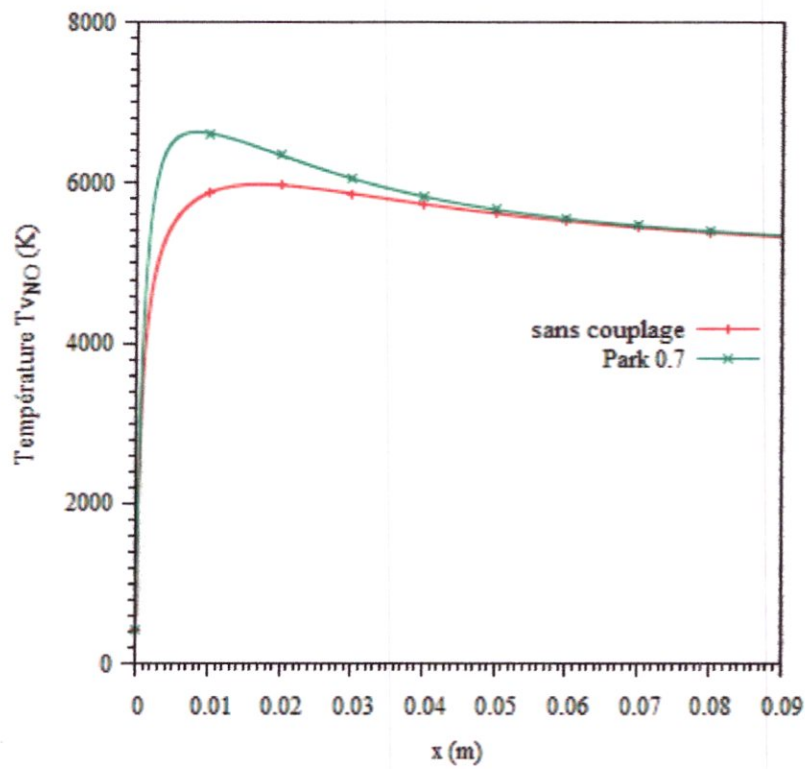


Figure 5.14 : Comparaison de la température de vibration de  $NO$  sans et avec couplage de Park à  $M = 16.3$ .



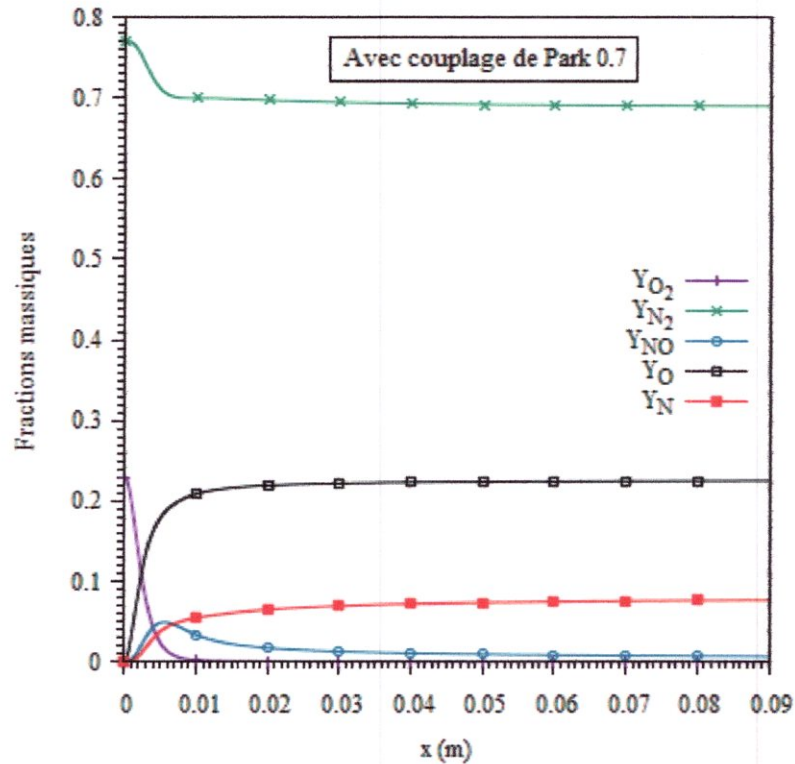


Figure 5.15 : Evolution des fractions massiques avec couplage de Park à  $M = 16.3$ .

## 5.3 Résultats de l'étude 2D

### 5.3.1 Sphère de Lobb

#### 5.3.1.1 Etude de sensibilité au maillage

Il est tout d'abord important de rappeler que le maillage peut être modifié dans la phase de simulation à l'aide de Fluent, on peut par exemple, faire une adaptation de maillage à l'aide de l'option (*adapt*), selon divers critères permettant de définir des régions à l'intérieur du domaine de calcul. L'adaptation n'est toutefois permise que sur la base d'une première solution pour l'écoulement. L'indépendance du maillage a été réalisée en utilisant un raffinement de solution adaptatif, puisque des cellules peuvent être rajoutées là où elles sont nécessaires dans la grille après obtention des résultats de simulation. Le maillage initial a été adapté en mettant plus de cellules dans les régions où le gradient de vitesse est plus élevé qu'un niveau choisi. Ce processus a été répété jusqu'à ce que les résultats deviennent indépendants du maillage. En effet, il existe une manière pratique en Fluent qui consiste à la surveillance de la valeur moyenne de certaines variables. Quand cette valeur cesse de changer, on cesse les itérations sans devoir attendre jusqu'à la convergence itérative, on adapte ensuite le maillage et on relance les

itérations. La solution peut être considérée indépendante du maillage quand la valeur moyenne cesse de changer entre les adaptations. Cette procédure a été appliquée pour chaque modèle de turbulence. On prend comme un exemple, le cas du modèle  $k-\omega$ , dans le tableau (5.1) on représente les nombres de mailles et de nœuds de chaque maillage utilisé lors de la simulation, le maillage adapté final est représenté dans la figure (5.16). Pour montrer l'influence de raffinement du maillage sur les calculs, nous avons opté pour présenter respectivement l'évolution de la température le long de la ligne d'arrêt « Axis\_Symmetry » du maillage initial et les maillages adaptés 1, 2, 3, 4 et 5 sur la figure (5.17), La figure nous montre que pour le maillage initial, la température varie de la valeur initial 293K à la valeur maximale de 8605K dans une distance de 0.15mm, et chaque fois qu' on adapte le maillage la température maximale augmente et la distance diminue où pour le maillage final « adapté 5 » la température augmente jusqu'à 10210K dans une distance de l'ordre de moins de 0.02mm. A partir du maillage adapté 4, la variation de la température n'est plus constatée lors du raffinement, c'est-à-dire. Même si on raffine plus en plus le maillage, les résultats ne sont plus dépendants de la solution du maillage, par conséquent, les graphes obtenus sont confondus (ici : maillage adapté 4 et 5) .Donc on peut considérer que le maillage « adapté 4 » est le maillage optimum où le résultat de la température est stable.

Tableau 5.1 : Nombre de nœud et maille de chaque maillage utilisé

Maillage	Initial	Adapté 1	Adapté 2	Adapté 3	Adapté 4	Adapté 5
Nombre de nœud	5202	6444	10700	24900	77166	284016
Nombre de maille	2500	3052	5002	11488	36694	138256

### 5.3.1.2 Etude de sensibilité aux modèles de turbulence

Généralement, l'étude de la sensibilité aux modèles de turbulence nécessite d'avoir recourt à l'expérience pour s'assurer de la validité des résultats obtenus et par conséquent conclure sur le choix du modèle adéquat. Dans notre cas et à cause de l'indisponibilité de l'expérience, on est amené à valider les résultats avec d'autres issus d'un calcul fait par Tristan [20]. En réalité, dans le travail de ce dernier, il a considéré un écoulement laminaire. Pour que nous soyons autorisés de faire la comparaison avec ses résultats, on a effectué dans un premier temps une simulation d'un écoulement laminaire, ensuite, on refait la simulation en considérant les deux modèles de turbulence  $k-\varepsilon$  et  $k-\omega$ . Sur la Figure (5.18), on a tracé les courbes de la température le long de la ligne d'arrêt pour : la cas des deux modèles de turbulence  $k-\varepsilon$  et  $k-\omega$ , le cas laminaire

et le résultat de Tristan. Tout d'abord, notons que le résultat dans le cas laminaire présente une bonne concordance avec celui de Tristan en termes d'allure et de valeurs, la légère différence constatée concernant la position du choc, qui ne dépasse pas 0.06 mm, et la valeur maximale de la température atteinte localement en choc, peut être justifiée ; Tristan a considéré un écoulement en hors d'équilibre vibrationnel, cependant, nous avons considéré l'écoulement à l'équilibre vibrationnel<sup>1</sup>,

Concernant les modèles de turbulence  $k - \varepsilon$  et  $k - \omega$  et toujours dans la même figure, on constate que la courbe de la température obtenue en considérant le modèle  $k - \omega$  est presque confondue à la courbe obtenue dans le cas laminaire ; la position du choc étant la même à une erreur absolue de l'ordre de 0.001 mm. Dans le cas du modèle  $k - \varepsilon$ , les résultats sont largement différents, soit en termes d'allure, soit en termes de la valeur maximale de la température atteinte. En outre La position de l'onde de choc par rapport au corps est plus grande.

Nous avons également représenté sur la figure (5.19) la position du choc dans, le cas des deux modèles de turbulences considérés et l'expérience où on a trouvé que deux points issu de la réf [19]. Cette figure permet de comparer entre les deux modèles de turbulence et de valider les résultats de la figure (5.18). Les résultats du modèle  $k - \omega$  présentent une bonne concordance avec l'expérience tandis que ceux du modèle  $k - \varepsilon$  sont largement différents comme prévu.

Finalement, on peut conclure que le modèle de turbulence adéquat pour cette étude est celui de  $k - \omega$ . Nous allons donc se limiter à ce modèle dans la suite de tout le chapitre.

Le profil de  $y^+$  du modèle  $k - \omega$  est représenté sur la figure (5.20). On remarque qu'il est inférieur à l'unité.

### 5.3.1.3 Variation du nombre de Mach de l'écoulement après le choc

La figure (5.21) représente les contours iso-Mach, la figure montre une chute sur la valeur de nombre de mach juste après l'onde de choc, tel que dans la partie avant de la sphère autour de l'axe de symétrie, le nombre de mach atteint une valeur inférieure à l'unité, car dans cette zone la paroi est perpendiculaire à l'écoulement, l'onde de choc est considéré comme une onde de choc normale où l'écoulement devient subsonique en aval. Dans les autres parties autour de la sphère,

<sup>1</sup> La modélisation du déséquilibre vibrationnel en Ansys Fluent est plus délicate, elle nécessite l'emploi des notions très avancés tels que les UDFs (User Defined Functions).

le nombre de Mach aval a également diminué mais il n'est pas nécessairement inférieur à l'unité car dans ces zones, l'onde de choc est oblique.

Le Nombre de Mach étant naturellement nul au voisinage des parois du corps ; c'est l'effet d'adhérence à la paroi, car il s'agit d'un fluide visqueux.

#### 5.3.1.4 Variation de la température de l'écoulement après le choc

La figure (5.22) montre une augmentation brusque de la température due à la traversée de l'onde de choc. Elle est donc maximale juste derrière l'onde de choc, puis elle diminue jusqu'à la paroi, et cela est due à l'apparition des phénomènes chimiques (les réactions de la dissociation et d'échange) qui sont des phénomènes endothermiques. On constate aussi que les valeurs maximales de température sont aux alentours de 10000K juste après l'onde de choc puis elle diminue jusqu'à l'équilibre. Cela est clairement présenté sur la figure (5.25) où le choc est positionné à une distance de 0.50 mm sur la ligne d'arrêt. En particulier, la température maximale atteinte est 10150K, puis elle diminue jusqu'à atteindre la température d'équilibre environ (6000K).

**Validation :** en comparant notre résultat de la figure (5.25) avec celui de Tristan [20] qui montre la variation de la température le long de la plage de relaxation, on remarque une bonne concordance entre les deux résultats en terme d'allure et en terme quantitatif. Comme on a mentionnée dans le (§ 5.3.1.2), la légère différence est due au fait que Tristan [20] a considéré un écoulement en hors d'équilibre vibrationnel. La relaxation vibrationnelle n'étant plus instantanée, sa contribution énergétique est plus faible. Cette énergie perdue se retrouve sous forme de température et sous forme d'énergie cinétique ; c'est pourquoi la température du mélange est plus forte et le choc s'éloigne de l'obstacle par rapport au cas d'équilibre vibrationnel [19].

Il faut noter que la diminution brusque de la température en s'approchant de la paroi est naturelle car la température de la paroi est fixée

#### 5.3.1.5 Variation du champ de pression

Concernant le champ de pression (figure 5.23), on constate une grande pression plus de 20000 Pa dans la partie avant du corps, ou bien dans la zone de relaxation, cela est due au freinage de l'écoulement engendré par le choc et par les phénomènes physico-chimiques. En comparant notre résultat de la figure (5.23) avec celui de Tristan de la figure (5.24), on remarque

une excellente similitude entre les deux résultats pour les différentes zones d'isobare dans la plage de relaxation.

### 5.3.1.6 Les fractions massiques des espèces

A la traversée du choc, une dissociation des molécules d'azote et d'oxygène, composants uniques de l'air au départ, a lieu. Les réactions endothermiques, petit à petit prennent place et font apparaître des espèces inexistantes jusqu'alors, comme les atomes d'azote et d'oxygène ainsi que du monoxyde d'azote (Figure 5.26). A l'approche de la paroi, la température diminuant pour atteindre la température de 1000 K, des réactions de recombinaisons libèrent de l'énergie, à leur tour, apparaissent. On voit très bien que le peu de molécules d'azote dissocié au passage du choc se recombinaient très vite dès que la température du mélange baisse. Il est intéressant de noter que les molécules d'oxygène se dissocient à plus de 95% tandis que les molécules d'azote se dissocient à moins de 10% de leurs valeurs respectives à l'infini amont du fait que la température caractéristique de  $O_2$  est à peu près deux fois plus faible que celle de  $N_2$ . Parallèlement à la disparition des molécules de l'azote et de l'oxygène, on constate que les deux atomes  $O$  et  $N$  se forment. D'après l'allure de ces courbes et d'un point de vue mathématique, on peut voir clairement que les taux de formation de  $O$  et  $N$  sont presque égales aux taux de disparition de  $O_2$  et  $N_2$  respectivement mais opposés en signes. Concernant la molécule de  $NO$ , elle commence à se former juste après le choc avec un taux presque égal à celui de la formation de l'atome  $N$ , puis elle commence à se dissocier au fur et à mesure qu'on s'éloigne de l'onde de choc.

Les résultats sont comparés avec ceux de Tristan [20] et ils présentent une bonne concordance, la différence est déjà justifiée. Les figures de (5.27) à (5.31) représentent respectivement les contours des fractions massiques, autour de la sphère, de  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$ ,  $O$  et  $N$ .



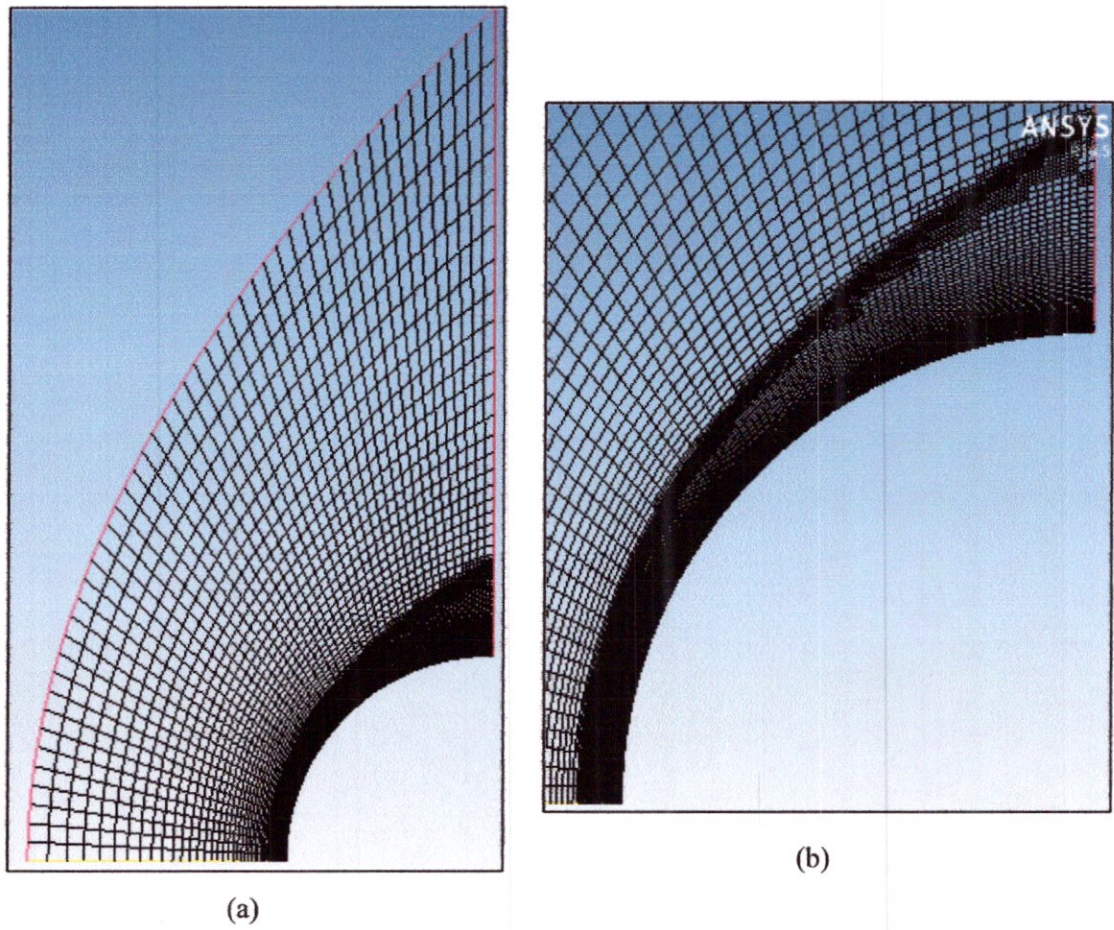


Figure 5.16 : (a) : Maillage adapté 4, (b) : agrandissement au voisinage du corps.

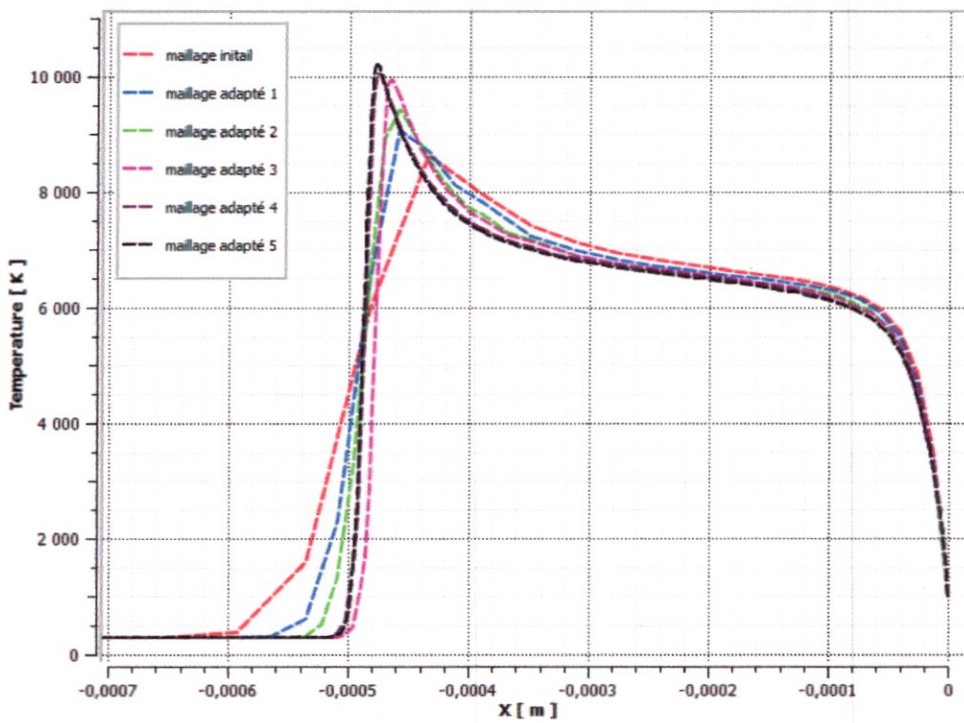


Figure 5.17 : La température le long de la ligne d'arrêt pour chaque maillage.

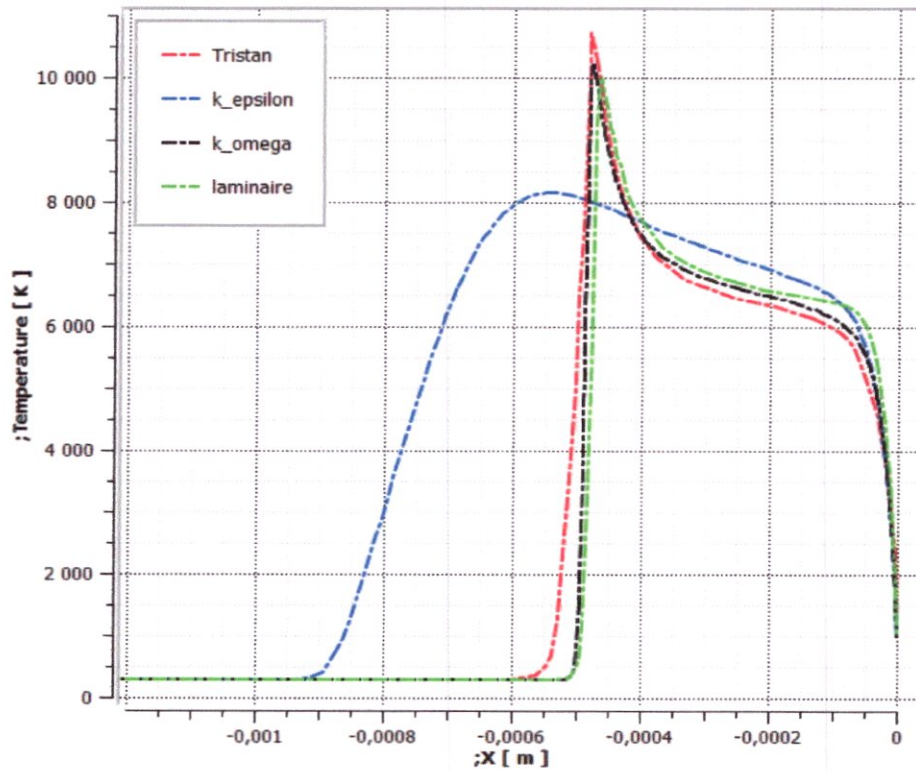


Figure 5.18 : La température le long de la ligne d'arrêt pour chaque modèle de turbulence, cas laminaire et le résultat de Tristan [20].

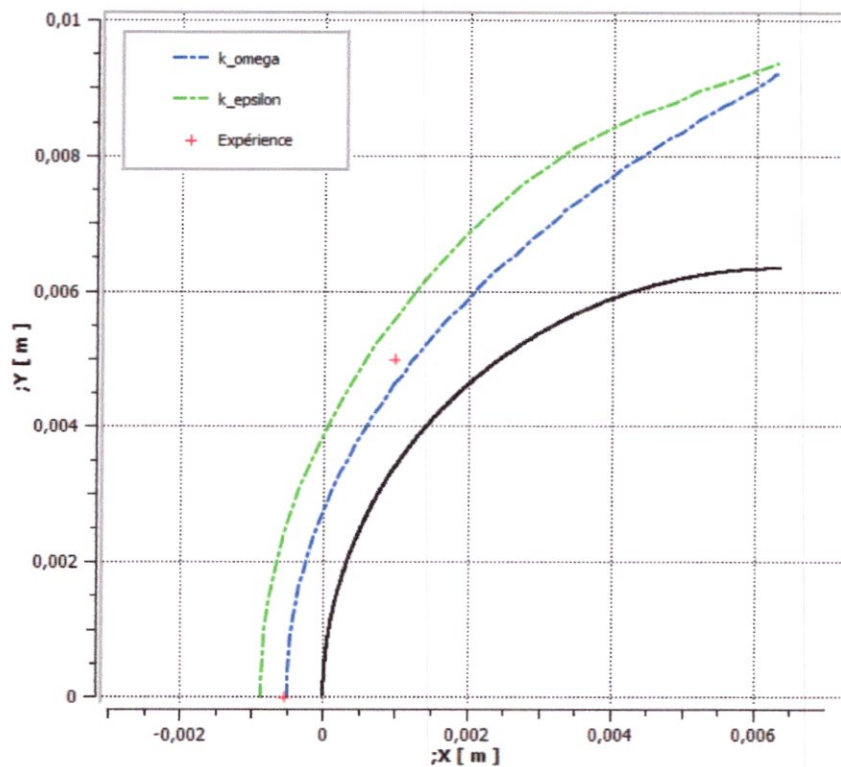


Figure 5.19 : Comparaison de distance de détachement du choc pour les deux modèles de turbulence et l'expérience.



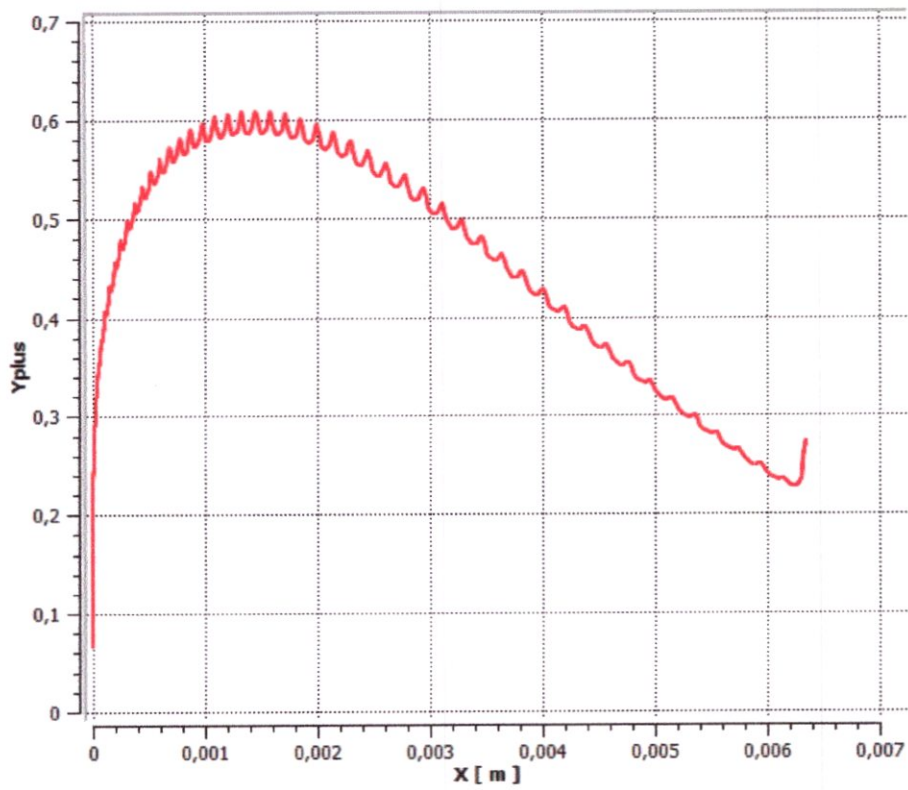


Figure 5.20 : Profil de  $y^+$  du modèle  $k - \omega$ .

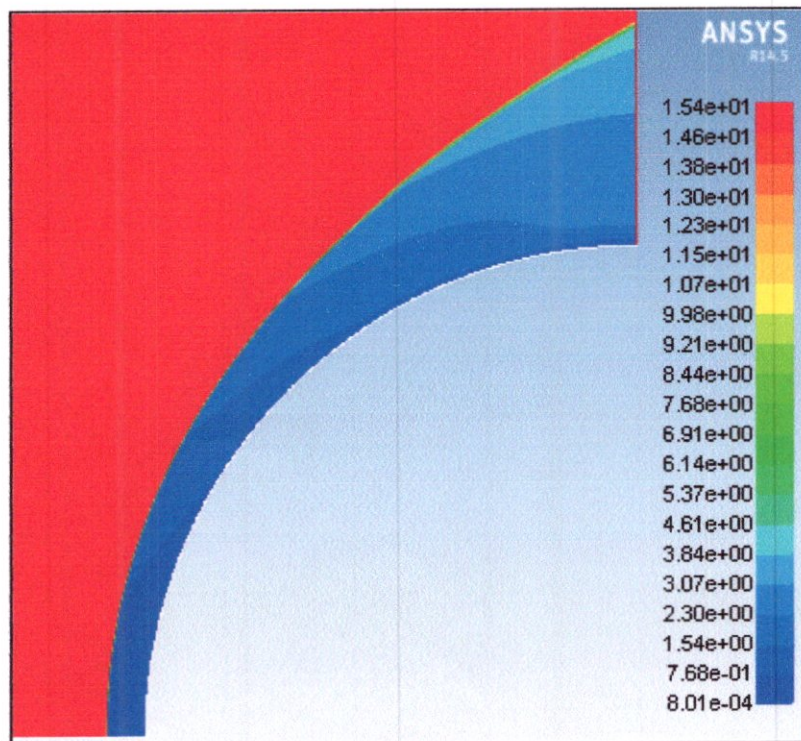


Figure 5.21 : Nombre de Mach autour de la sphère.

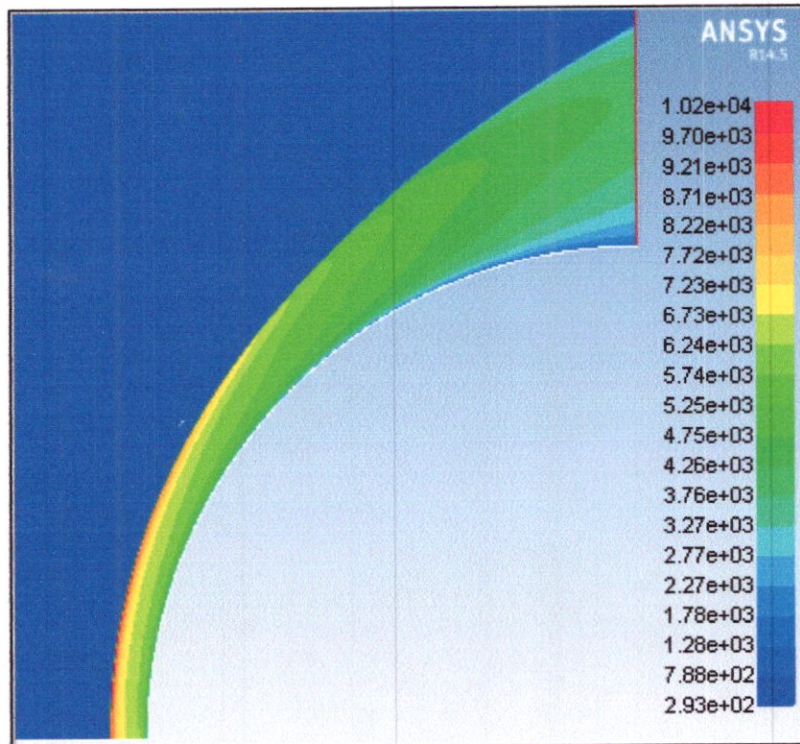


Figure 5.22 : Champ de température autour de la sphère.

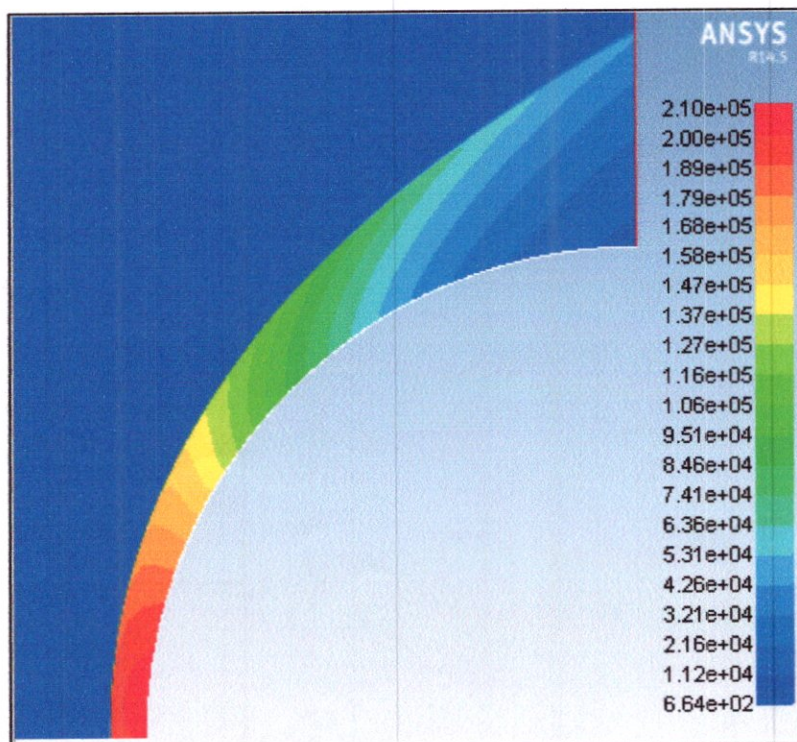


Figure 5.23 : Champs de pression autour de la sphère.



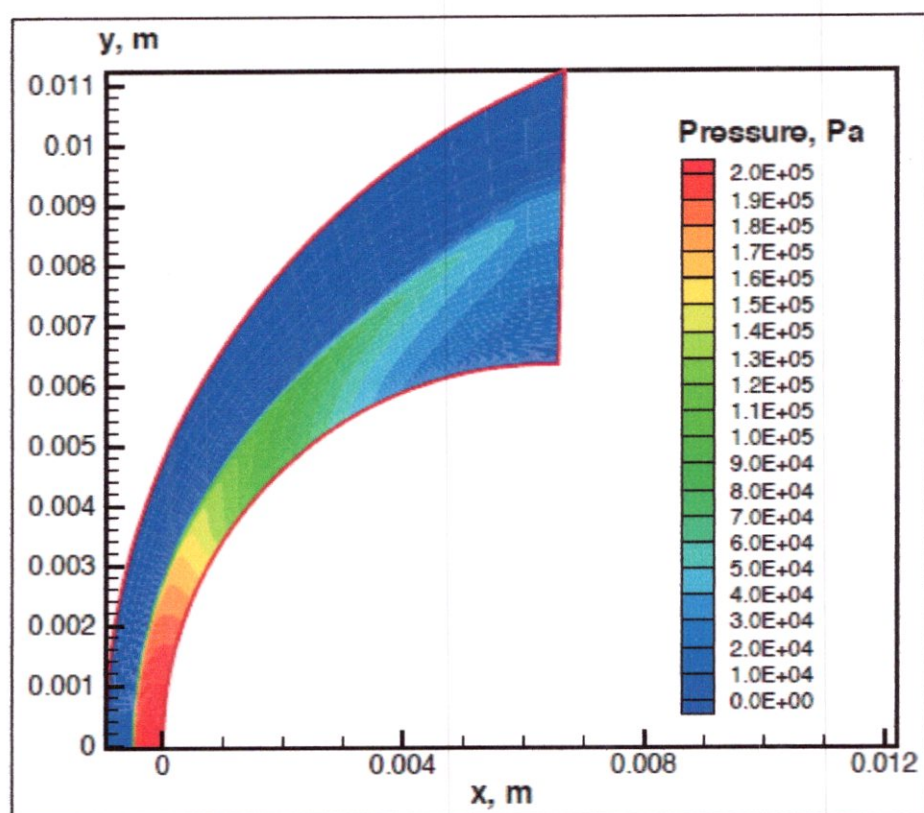


Figure 5.24 : Champ de pression le long de la plage de relaxation "Tristan [20]".

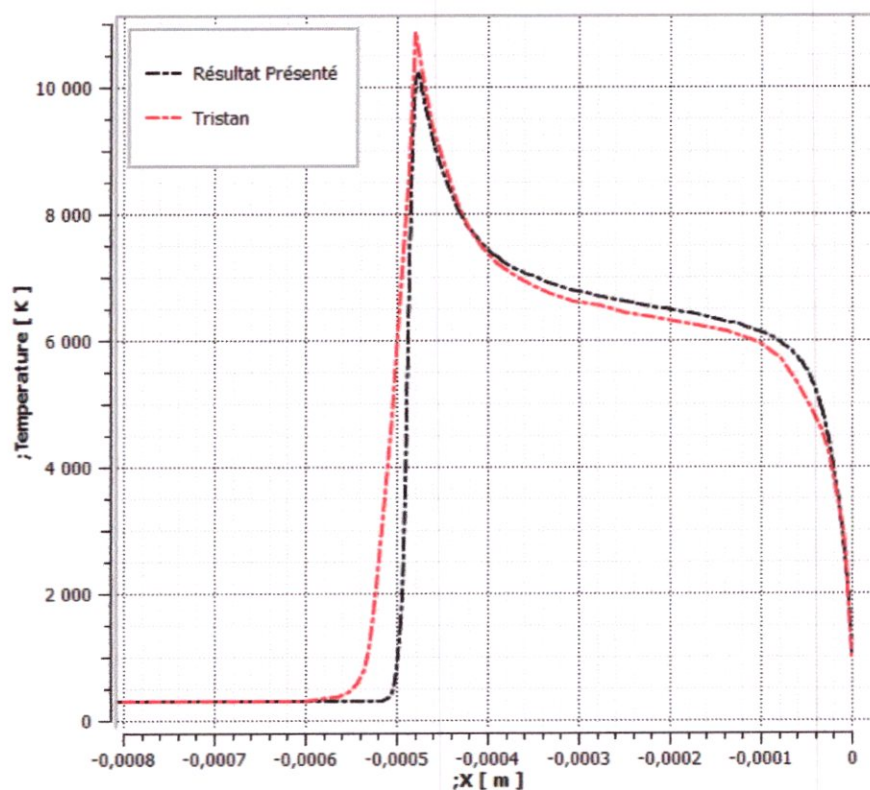


Figure 5.25 : Température le long de la ligne d'arrêt.

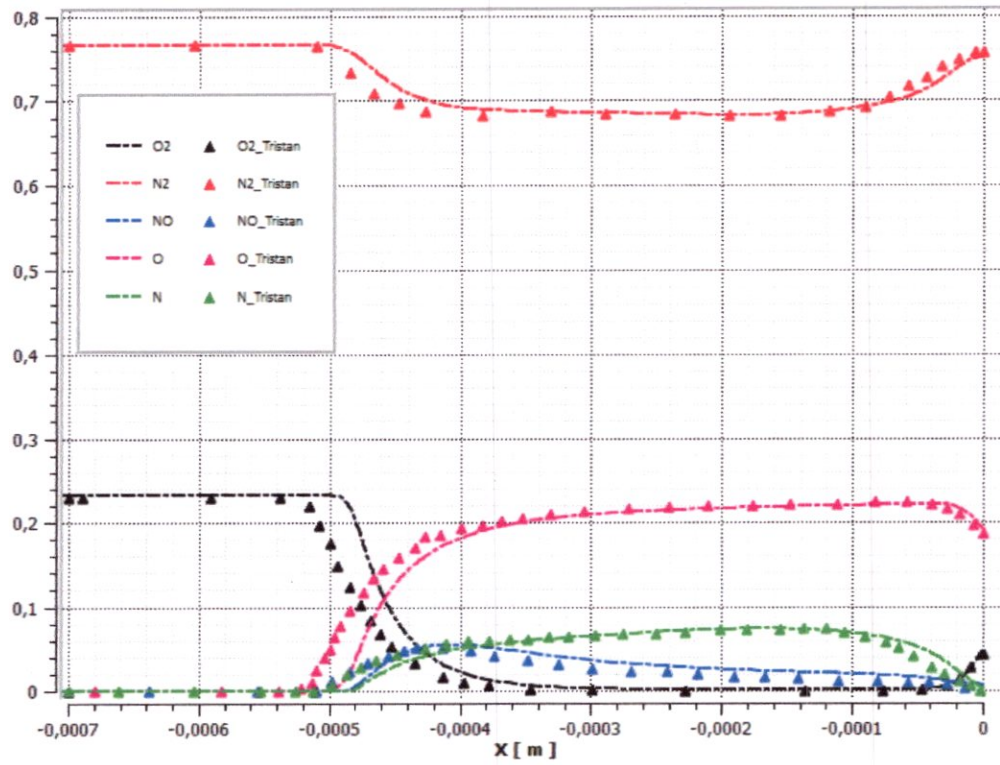


Figure 5.26 : Les fractions massiques des espèces le long de la ligne d'arrêt.

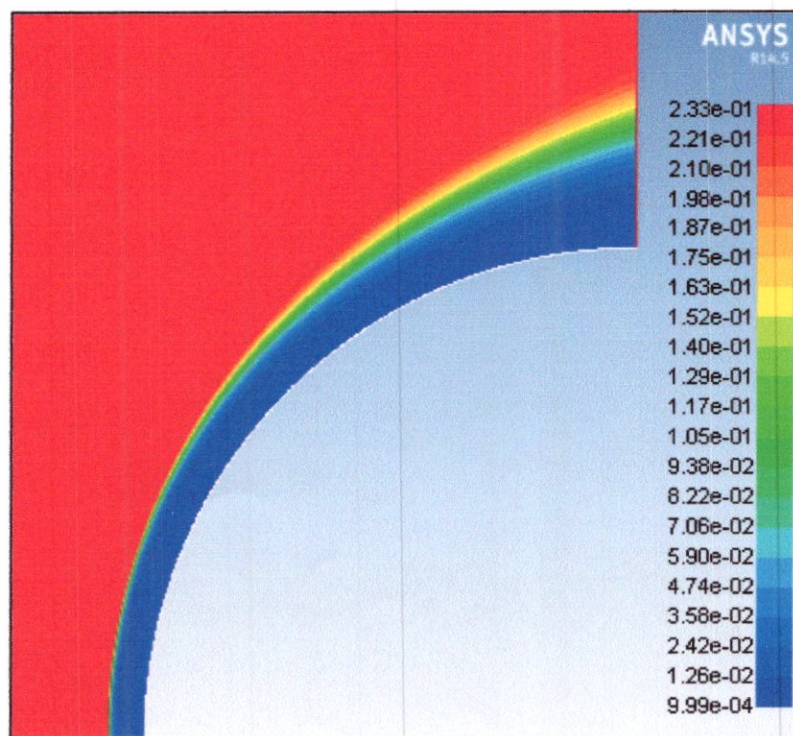


Figure 5.27 : Fraction massique de  $O_2$  autour de la sphère.



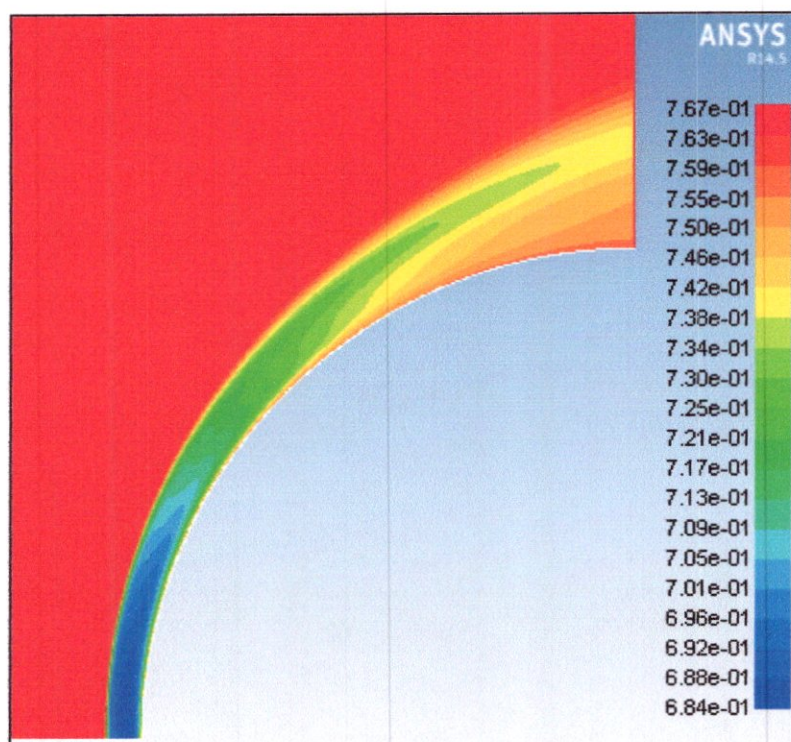


Figure 5.28 : Fraction massique de  $N_2$  autour de la sphère.

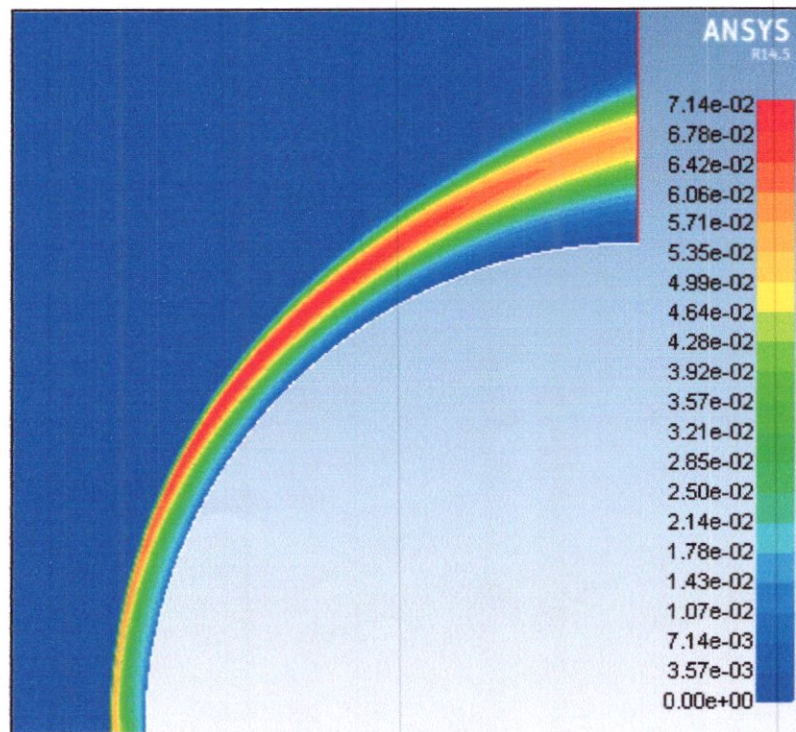


Figure 5.29 : Fraction massique de  $NO$  autour de la sphère.



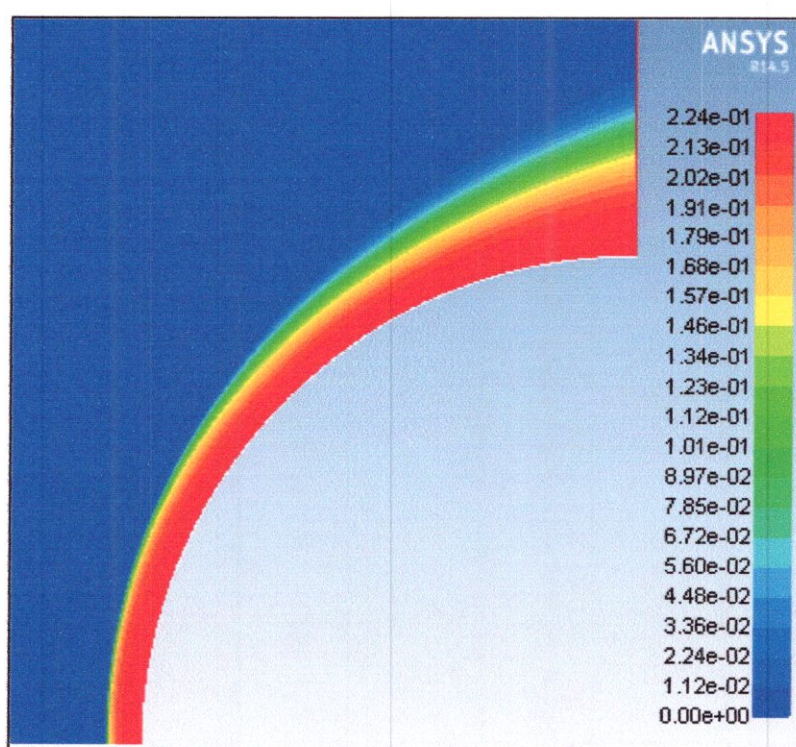


Figure 5.30 : Fraction massique de  $O$  autour de la sphère.

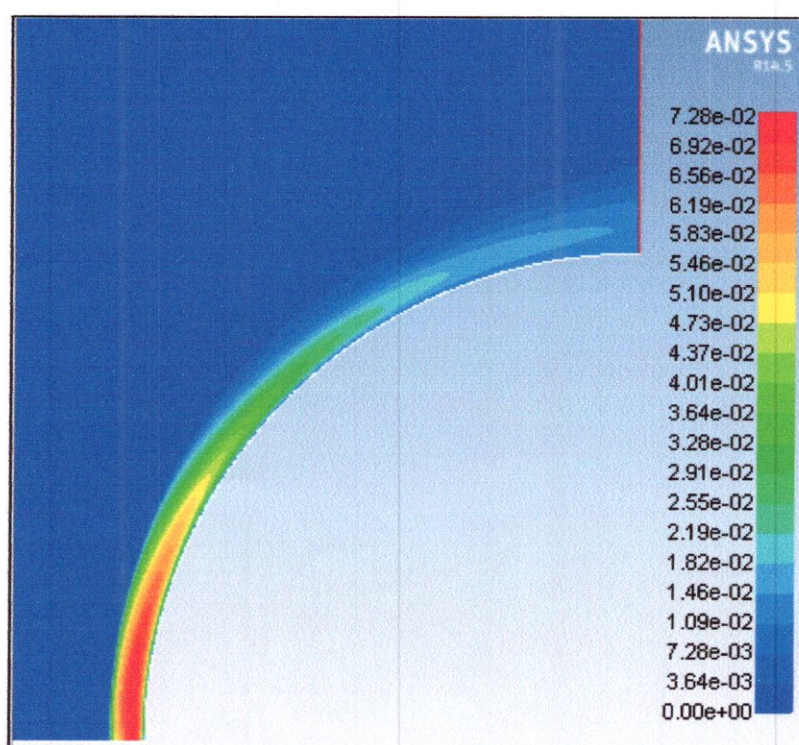


Figure 5.31 : Fraction massique de  $N$  autour de la sphère.



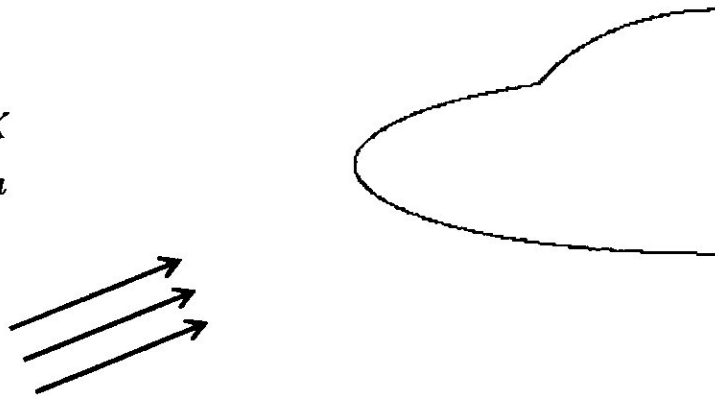
### 5.3.2 Double Ellipse :

La deuxième partie de simulation 2D est consacré à l'étude d'un écoulement à  $30^\circ$  d'incidence autour d'une double ellipse modélisant la navette spatiale européenne HERMES. Cette géométrie a été proposée comme un cas de test « Problème 6.2 » dans la référence [13]. La géométrie est définie par les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \left(\frac{x}{0.6}\right)^2 + \left(\frac{y}{0.15}\right)^2 &= 1 \quad ; x \leq 0 \\ \left(\frac{x}{0.35}\right)^2 + \left(\frac{y}{0.25}\right)^2 &= 1 \quad ; x \leq 0, y \geq 0 \end{aligned} \quad (5-1)$$

Concernant les conditions à l'infini amont considérés dans cette simulation, on a choisis le point H1 (cf. tableau 3.1, chapitre 3) correspondant à l'altitude de 75 km, la pression et la température en amont valent respectivement 2.52 Pa et 205 K, le nombre de Mach étant de 25. La température moyenne de la paroi est de 1500 K. La paroi est supposée non-catalytique.

$$\begin{aligned} M_\infty &= 25 \\ T_\infty &= 205.3K \\ P_\infty &= 2.52Pa \\ \alpha &= 30^\circ \end{aligned}$$



Le maillage initial de calcul représenté sur la figure (5.27), est un maillage structuré à cellules quadrilatères de  $50 \times 220$  mailles, les mêmes procédures suivies dans la simulation précédente (sphère de Lobb) sous Fluent, choix de solveur...etc., ont été suivies dans la présente simulation. Le modèle de turbulence choisi est celui de  $k - \omega$ <sup>2</sup> et la sensibilité au maillage a été étudiée, on présente dans la Figure 5.28) le maillage optimum (160370 mailles), sans expliciter les maillages intermédiaires. Les résultats du calcul ont été comparé avec ceux de la référence [30].

<sup>2</sup> On a choisi ce modèle puisqu'il présente de bons résultats dans le cas de la sphère de Lobb.

### 5.3.2.1 Variation du nombre de Mach de l'écoulement après le choc

Les isovaleurs du nombre de Mach ont été représentés sur la figure (5.34), on remarque une chute de la valeur du nombre de Mach juste après l'onde de choc, cette diminution est plus marquée autour de l'axe de symétrie horizontale de la première ellipse (nez de la navette) où l'onde de choc peut être assimilée à une onde de choc normale. Il faut noter aussi que le nombre de mach étant naturellement nul autour du corps aux voisinages des parois à cause de l'effet d'adhérence car il s'agit d'un fluide visqueux.

### 5.3.2.2 Variation du champ de pression

La figure (5.35) montre la distribution du champ de pression autour de la double ellipse. On constate que la pression s'augmente après l'onde de choc, elle est maximale au nez de la double ellipse où elle atteint environ 2110 Pa, car l'onde de choc est assimilée à une onde de choc droite. Elle est aussi considérable à la surface inférieure de la double ellipse qu'à la surface supérieure.

Pour s'assurer des résultats obtenus, on a comparé le coefficient de pression (Figure 5.36) avec le résultat obtenu par Gökçen [30] (Figure 5.37), on constate que les lignes iso-pression présentent une bonne similitude avec le résultat de la référence.

On a tracé également, le profil du coefficient de pression sur la paroi (Figure 5.38). La figure affirme que la surpression est plus marquée sur la surface inférieure de la double ellipse qu'à la surface supérieure, où le coefficient de pression augment de 0.4 jusqu'à une valeur maximale de 1.9 alentour du nez, ensuite le graphe présente une chute brusque sur la valeur de coefficient de pression sur la surface supérieure de double ellipse, où elle attient des valeurs en dessous de 0.1, elle présente une légère augmentation au voisinage de la cabine (ellipse supérieure) due à la traversée d'une onde de choc faible qui se crée à ce niveau.

### 5.3.2.3 Variation de la température

Les contours de la température autour de la double ellipse sont présentés dans la figure (5.39). à la traversée de l'onde de choc, la température augmente brusquement juste à la traversée du choc, tel que la valeur atteint localement une température maximale d'environ 16000 K, puis elle diminue de façon très rapide pour atteindre l'équilibre ; environ 8000 K, ceci est dû évidemment du fait des réactions chimiques qui ont lieu dans la couche de choc. On remarque aussi que la température augmente légèrement alentour de la cabine où elle atteint une valeur d'environ 4300 K. La diminution de la température de 8000 K jusqu'à 1500 K étant naturelle car la température de la paroi est fixée à 1500 K.

La comparaison avec le résultat de [30] présente quelques différences sur les valeurs locales de la température, car, ce dernier a considéré l'écoulement en déséquilibre vibrationnel et par conséquent les valeurs de la température dans la couche de choc vont décroître du fait que ces phénomènes sont de nature endothermique.

#### 5.3.2.4 Les fractions massiques des espèces

On ce qui concerne les fractions massiques des espèces chimiques, on a représenté sur la Figure (5.41) les contours de la fraction massique de l'oxygène moléculaire, on constate aisément que ce dernier se dissocie presque complètement où il atteint un pourcentage de  $1.46 \times 10^{-4}\%$  de la masse du mélange réactif, on note aussi que ce processus de dissociation de  $O_2$  s'effectue sur une distance très petite (disparition presque instantanée).

Sur la figure (5.42), on a représenté les contours de la fraction massique de l'azote moléculaire où on constate une dissociation graduelle de  $N_2$  jusqu'à atteindre un pourcentage minimal d'environ 45% du mélange réactif au voisinage de l'avant du nez de la navette.

La figure (5.43), présente les contours de la fraction massique du monoxyde d'azote, on remarque qu'il se forme au voisinage de l'aval du choc normal (environ 0.0652%) puis il se dissocie jusqu'à la disparition autour de la paroi.

Sur la figure (5.44), on représente les contours de la fraction massique de l'atome de l'oxygène, on constate une formation considérable de  $O$  alentour de la navette où il atteint 23.3% de la composition du mélange, cette formation a lieu sur une distance très petite due à la dissociation approximativement complète de l'oxygène moléculaire.

Concernant l'atome de l'azote on a représenté sur la figure (5.45) les contours de sa fraction massique, la figure nous montre une formation plus lente, la valeur maximale de la fraction de  $N$  est atteinte alentour du nez de navette, où elle atteint une valeur de 30.6%.



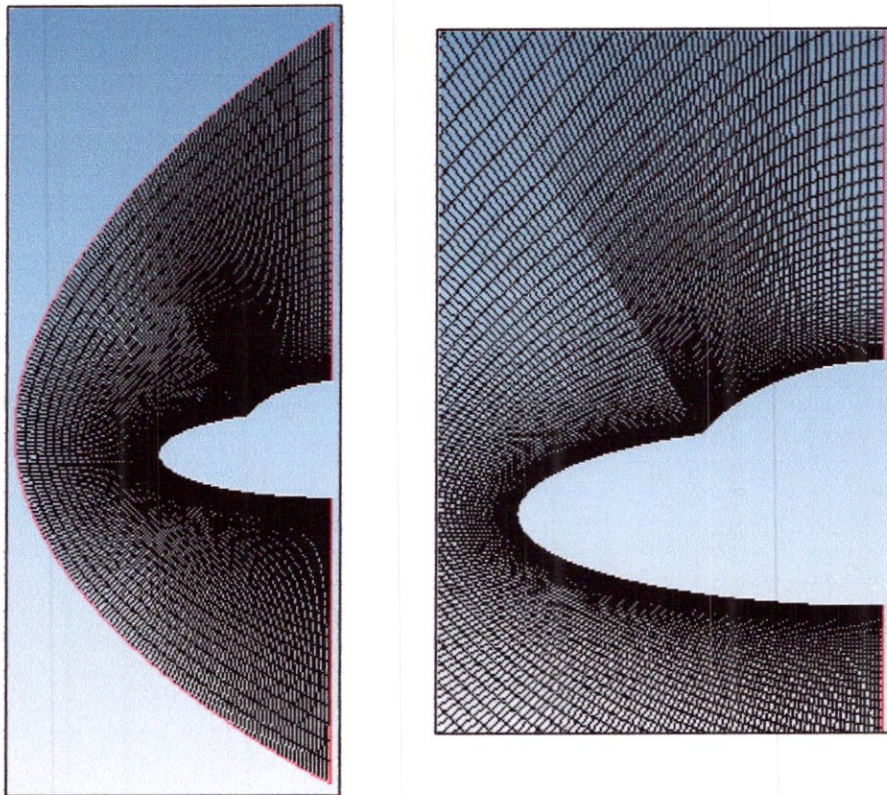


Figure 5.32 : Maillage initial « double ellipse »  $50 \times 220$  mailles.

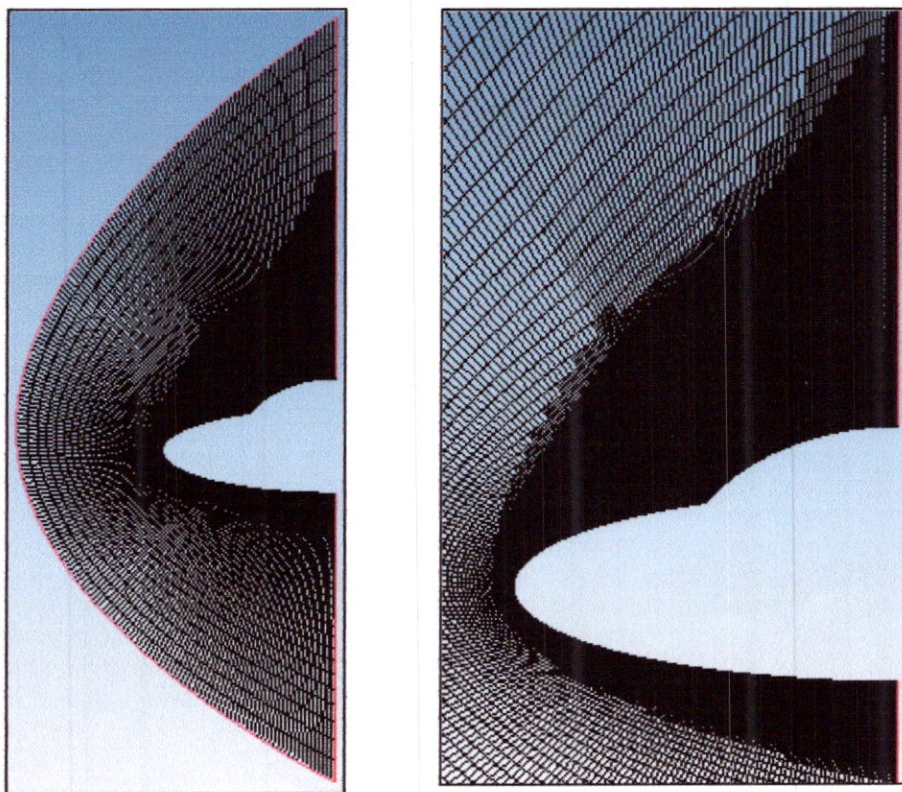


Figure 5.33 : Maillage adapté « double ellipse » 160370 mailles.



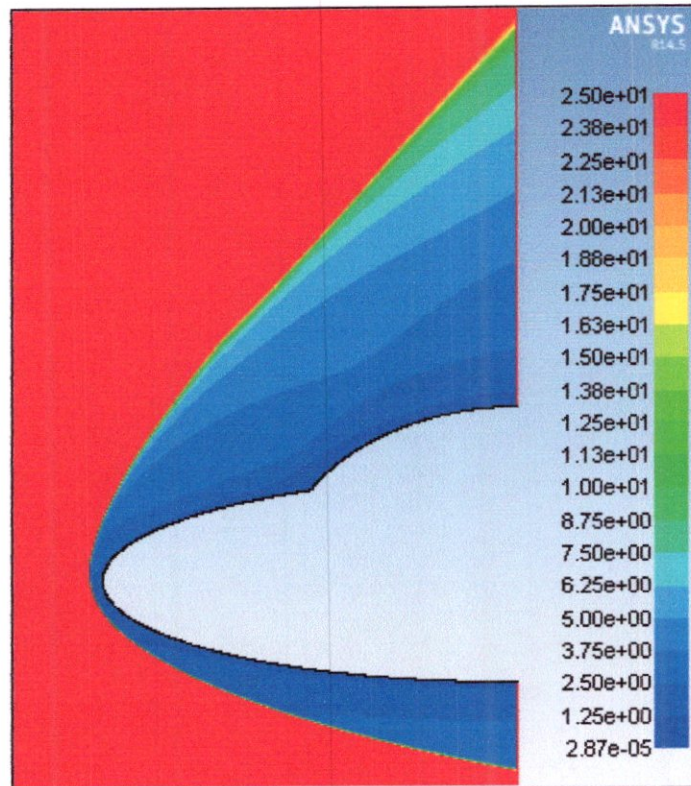


Figure 5.34 : Nombre de Mach autour la double ellipse.

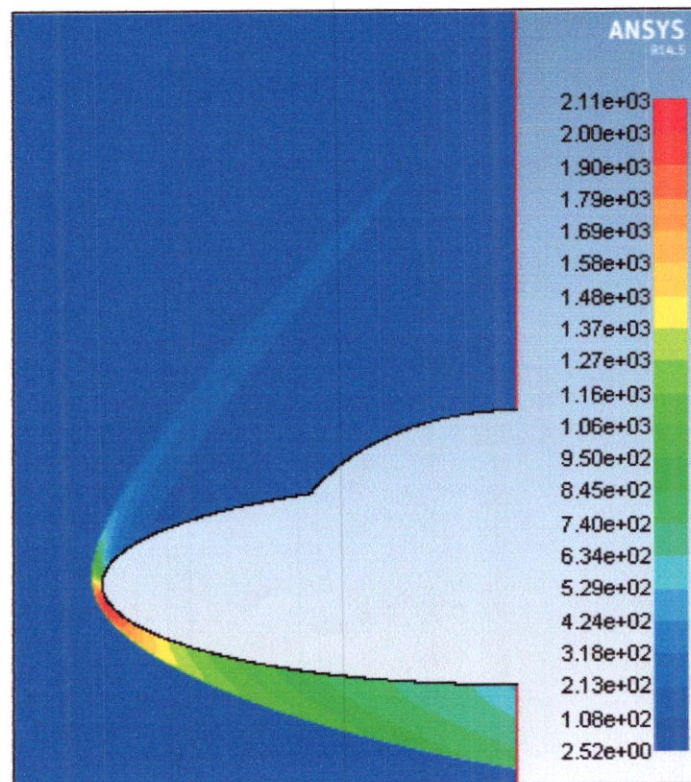


Figure 5.35 : La pression autour de la double ellipse.

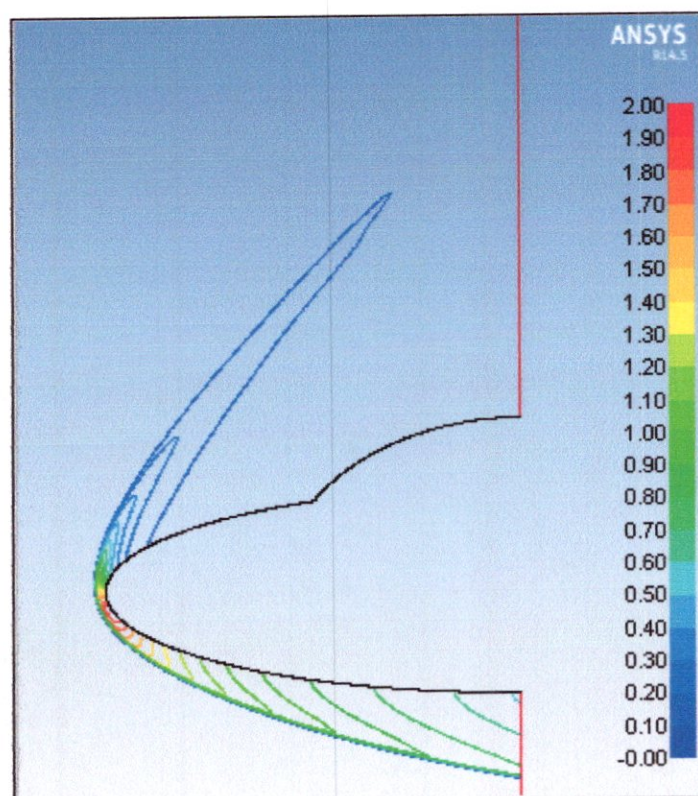


Figure 5.36 : coefficient de pression autour de la double ellipse.

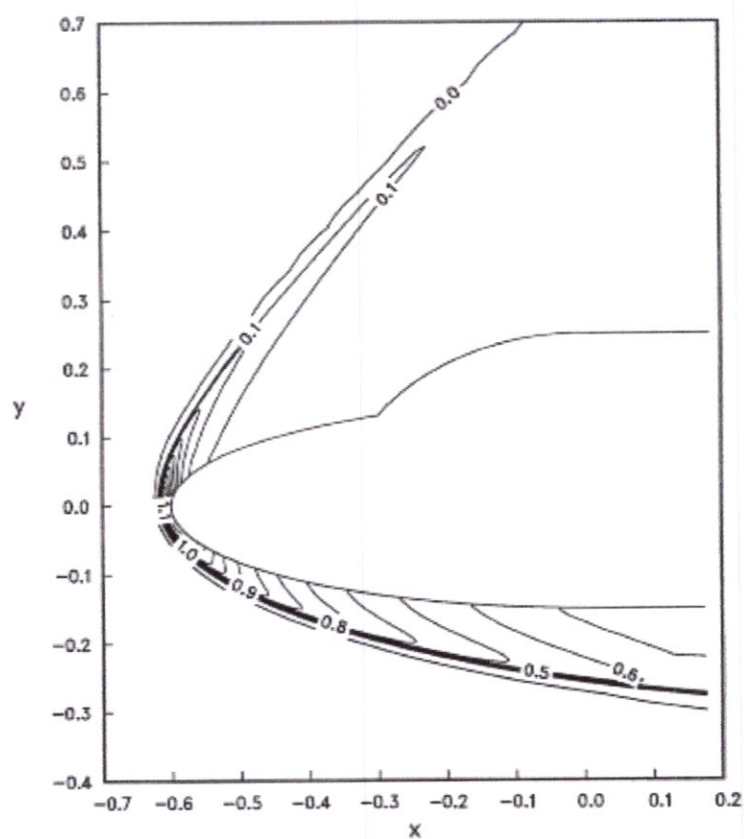


Figure 5.37 : Coefficient de pression autour de la double ellipse « Gökçen [30] ».



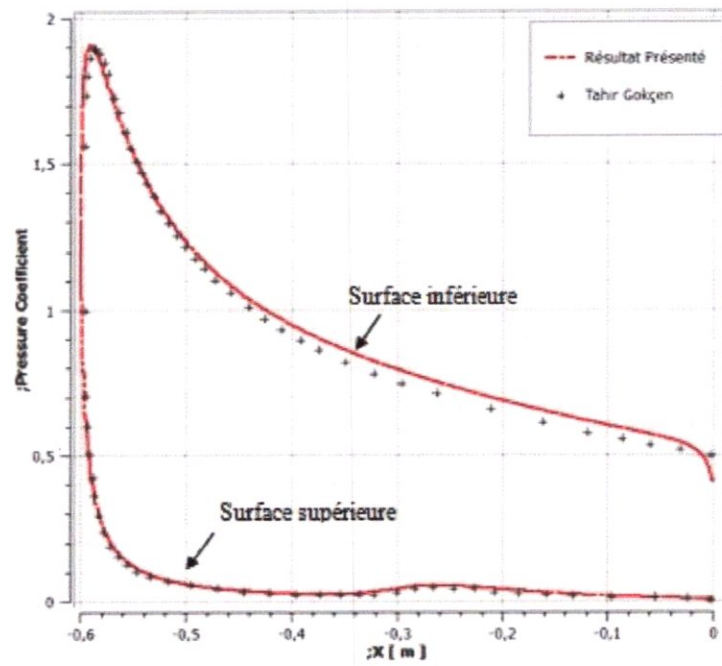


Figure 5.38 : Profil de coefficient de pression sur la paroi.

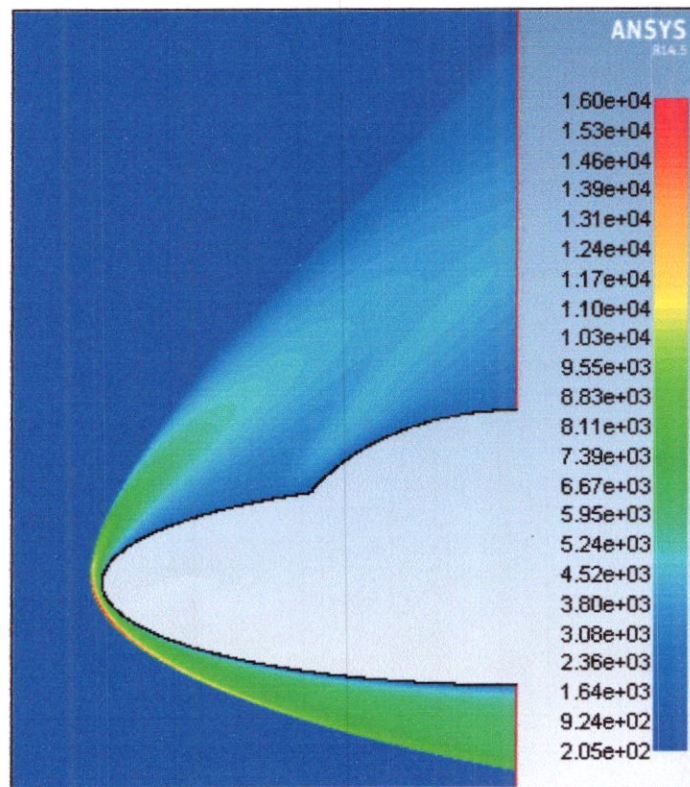


Figure 5.39 : Evolution de la température autour de la double ellipse.

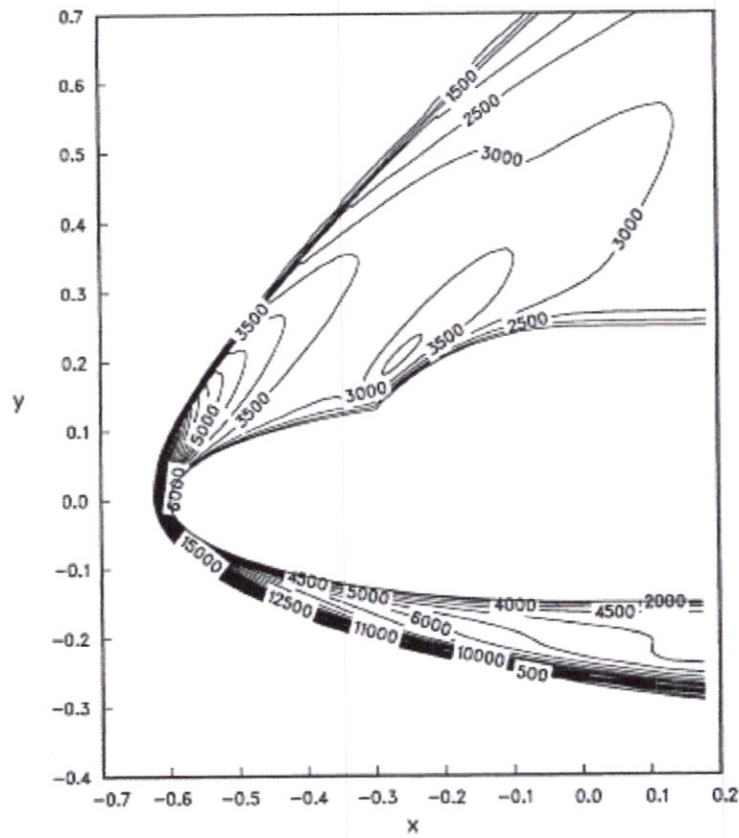


Figure 5.40 : Evolution de la température autour de la double ellipse « Gökçen [30] ».

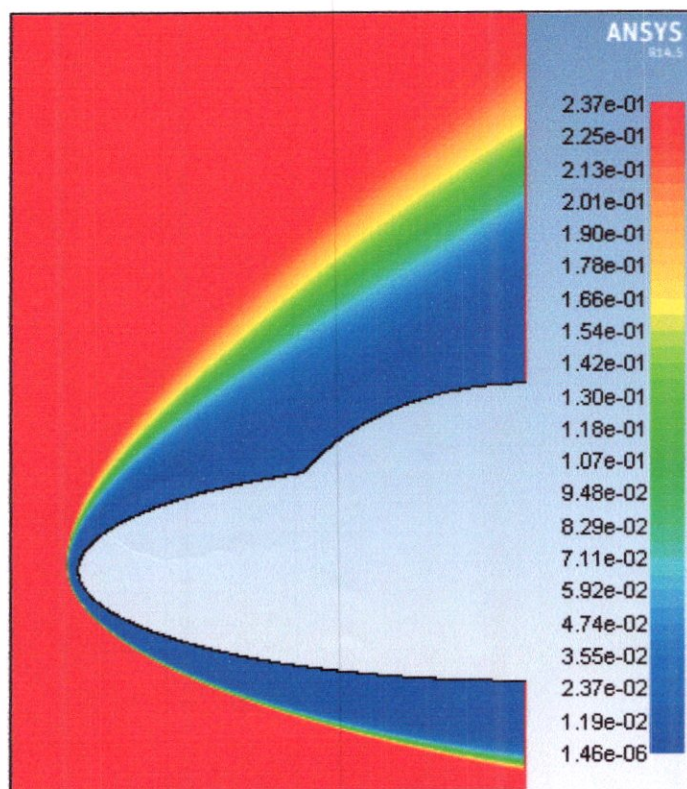


Figure 5.41 : La fraction massique de  $O_2$  autour de la double ellipse.



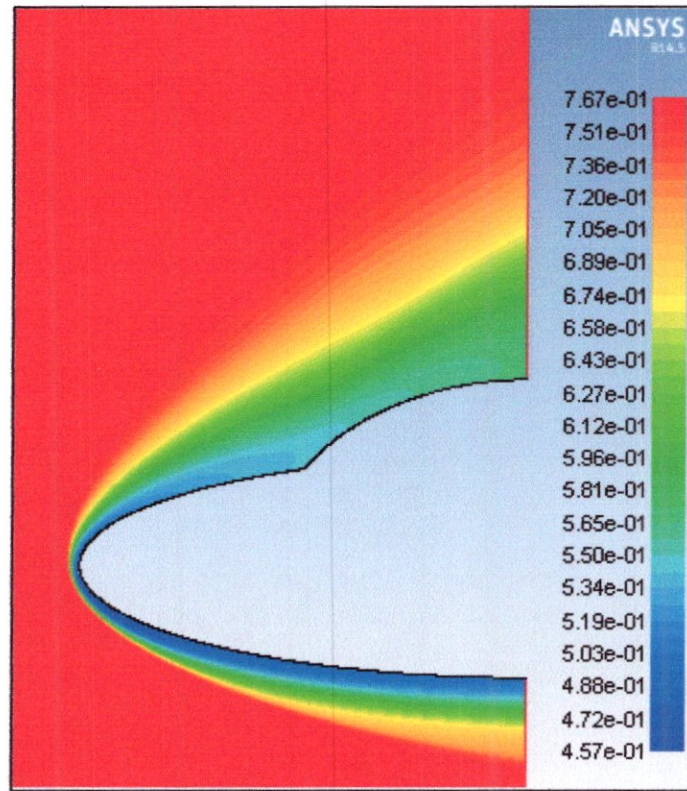


Figure 5.42 : La fraction massique de  $N_2$  autour de la double ellipse.

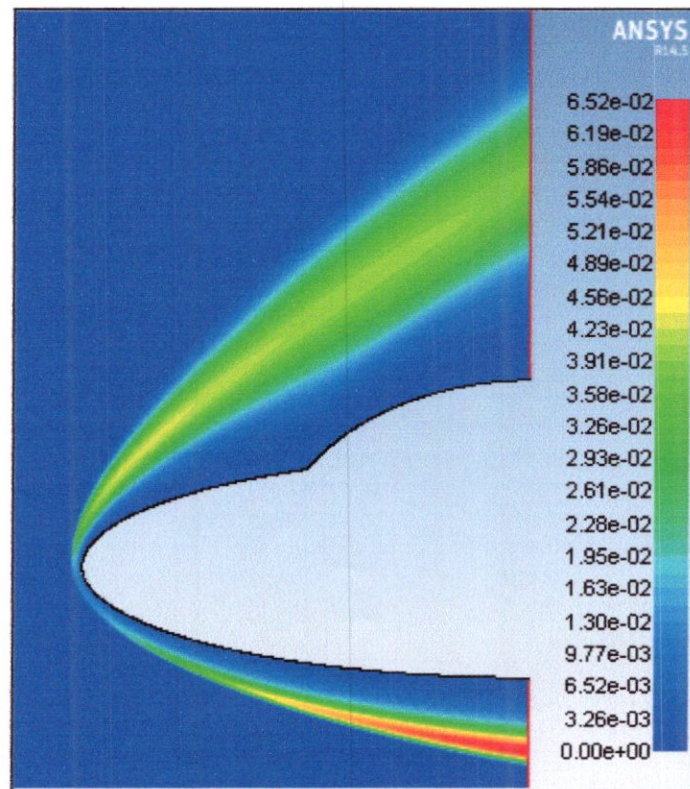


Figure 5.43 : La fraction massique de  $NO$  autour de la double ellipse.

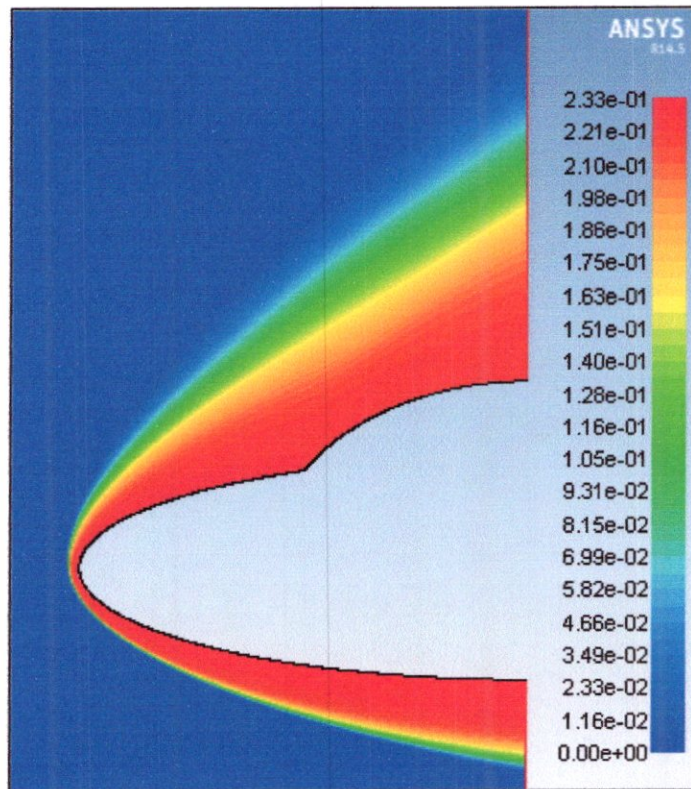


Figure 5.44 : La fraction massique de  $O$  autour de la double ellipse.

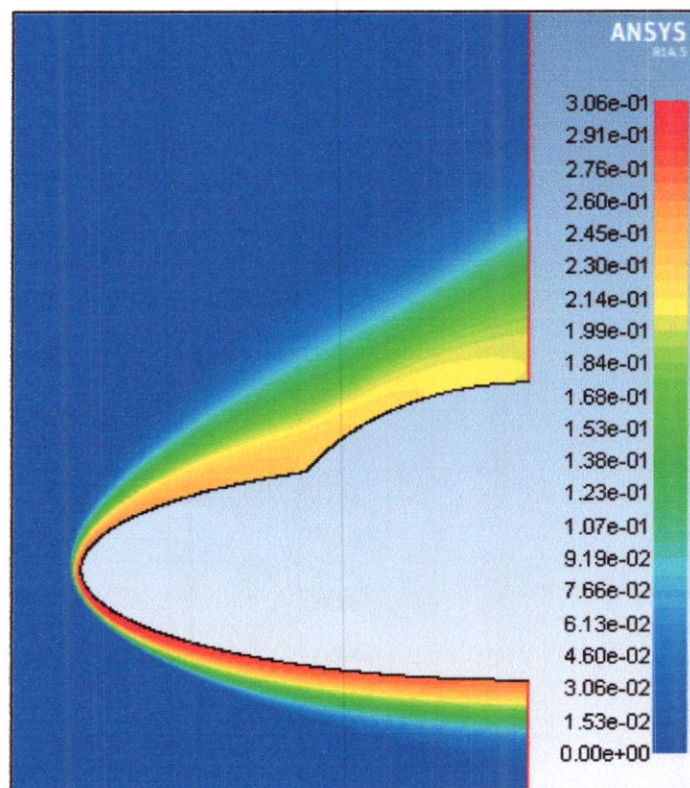


Figure 5.45 : La fraction massique de  $N$  autour de la double ellipse.



## 5.4 Conclusion

Ce dernier chapitre est consacré principalement à la présentation des différents résultats obtenus par les deux études principales faites dans ce travail. Concernant l'étude 1-D elle nous a permis d'établir une première approche de la modélisation des phénomènes de non-équilibre dans l'air. Mais le manque de résultats expérimentaux dans la littérature existante pose bien entendu le problème de la qualification des résultats obtenus.

Pour assurer de la réalité physique des solutions obtenus, cette étude nous a permis de vérifier certains aspects réels, tel que l'écoulement derrière l'onde de choc normale dépendait fortement des conditions initiales où la plage de la relaxation est relativement courte quand le nombre de Mach à l'infini amont augmente.

Dans la deuxième partie consacrée à la présentation des résultats de l'étude d'un écoulement en hors d'équilibre chimique en utilisant la suite des logiciel ANSYS, ces résultats ont été comparés avec la littérature scientifique, où ils présentent de bonnes concordance et par conséquent s'assurer de leurs validités.



## **CONCLUSION**

## CONCLUSION

Ce travail consacré à la simulation numérique d'un écoulement hypersonique en hors d'équilibre thermochimique autour d'un corps arrondi, rencontré dans les rentrées atmosphériques des engins spatiaux, ce type d'écoulements est gouverné par les équations de Navier-Stokes couplés avec les équations de relaxation des phénomènes physico-chimiques. Le fluide étant de l'air où il a été simulé, dans la couche de choc, à un mélange de gaz réactif, constitué de 5 espèces réagissant entre elles suivant le modèle de Zeldovich à 17 réactions élémentaires et dans lequel se propage une onde de choc intense. Une attention particulière est focalisée sur la modélisation du déséquilibre chimique et vibrationnel en tenant compte du modèle réactionnel et des termes sources ainsi les différents modes de couplage.

Cette étude est subdivisée en deux parties, la première est consacrée à l'étude de l'écoulement en aval d'une onde de choc droite afin d'évaluer l'influence des différents processus prisent en compte dans le modèle établi. Un code (Fortran + Visual Basic) est réalisé pour résoudre les équations modélisant l'écoulement en déséquilibre thermochimique qui sont couplées avec les équations de relaxations de vibration des molécules et complétés par une loi d'état. L'influence de la vibration sur la chimie est ainsi considérée en adoptant le modèle de Park . Le domaine de calcul (couche de choc) est discrétisé à l'aide de la méthode des différences finis, et le système d'équation algébrique non linéaire obtenu est résolu par la méthode classique de la substitution successive et la méthode de Newton appliquée aux systèmes.

Dans la deuxième partie on a présenté l'étude d'un écoulement hypersonique bidimensionnel visqueux et qui se trouve en déséquilibre chimique autour des corps émoussés tel que la sphère de Lobb et la double ellipse modélisant le nez de la navette spatiale « Hermès » avec la prise en compte des modèles de turbulence. Cette contribution est réalisée à l'aide de logiciel ANSYS 14.5 où on a focalisé sur le comportement de l'écoulement réactif et les phénomènes physico-chimiques qui prennent naissance en aval de l'onde de choc intense qui apparait en amont de l'obstacle.

Cette étude révèle et met en évidence beaucoup d'aspects physiques très importants pour la modélisation et la simulation du comportement d'un écoulement hypersonique, ces derniers peuvent être résumés dans ce qui suit :

- ✓ Le calcul des paramètres de l'écoulement et les concentrations des différentes espèces chimiques se fait pas à pas en fonction du temps jusqu'à atteindre l'état d'équilibre.
- ✓ Il a été remarqué que plus la vitesse de l'engin est grande plus la température derrière le choc est grande et plus l'énergie de vibration est grande (caractérisée par la température de vibration), et parmi les phénomènes physico-chimiques qui se passent derrière un choc intense pour différents nombre de Mach de vol à une altitude constante, on constate la diminution de la température du gaz, la vibration des molécules et aussi d'autres phénomènes comme la dissociation, l'évolution vers l'équilibre dépend de la complexité de tous ces processus et les différents échanges entre eux.
- ✓ la position de l'onde de choc est localisée par rapport à l'obstacle, cette dernière est de l'ordre de 0.50 mm (sphère de Lobb), résultat très proche du résultat expérimental, en outre on a pu simuler le comportement de l'écoulement dans la plage de relaxation et déterminer les différents paramètres à savoir le nombre de Mach le champ de pression et de température ainsi les fractions massiques des espèces. La variation de ces paramètres est influencée par la création de l'onde de choc en amont de l'obstacle aussi bien par l'apparition des phénomènes physico-chimiques qui ont la nature endothermique et qui forment un bouclier thermique protectif de la paroi.

En fin nos résultats sont comparés avec ceux de la littérature scientifique spécialisée où on remarque une bonne concordance et qu'ils corroborent avec ceux de Tristan SOUBRIE [20], Tahir Gökçen [30] et l'expérience.

Comme perspectives, ce travail n'est qu'une ébauche concernant les phénomènes rencontrés en régimes hypersoniques où les recherches sont très intenses dans cet axe. Pour s'approcher plus en plus de la réalité des choses, il serait intéressant d'étendre notre code Fortran au 2D en tenant compte de la méthode des volumes finies, et considérer les différents processus qui y interviennent, à titre d'exemple, les phénomènes d'ionisation, radiation, diffusion, les couplages entre les différents degrés de libertés...etc. Pour l'utilisation des codes CFD, il est aussi intéressant de reprendre cette étude avec le code OPEN FOAM.

## APPENDICE A

### EXPLICATION DU CALCUL DE $\omega_{c,s}$

Exprimons les termes de production :  $\omega_{c,O_2}$ ,  $\omega_{c,N_2}$ ,  $\omega_{c,NO}$ ,  $\omega_{c,O}$  et  $\omega_{c,N}$  en fonction des bilans des différentes réactions :

Pour les réactions  $r$  de 1 à 17, les bilans sont:

$$\begin{aligned}
 r = 1 : \quad & J_1 = \left[ k_{d,1} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right)^2 - k_{i,1} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^2 \right] \\
 r = 2 : \quad & J_2 = \left[ k_{d,2} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) - k_{i,2} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^2 \right] \\
 r = 3 : \quad & J_3 = \left[ k_{d,3} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) - k_{i,3} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^2 \right] \\
 r = 4 : \quad & J_4 = \left[ k_{d,4} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) - k_{i,4} \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^3 \right] \\
 r = 5 : \quad & J_5 = \left[ k_{d,5} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) - k_{i,5} \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^2 \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right] \\
 r = 6 : \quad & J_6 = \left[ k_{d,6} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) - k_{i,6} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^2 \right] \\
 r = 7 : \quad & J_7 = \left[ k_{d,7} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right)^2 - k_{i,7} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^2 \right] \\
 r = 8 : \quad & J_8 = \left[ k_{d,8} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) - k_{i,8} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^2 \right] \\
 r = 9 : \quad & J_9 = \left[ k_{d,9} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) - k_{i,9} \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^2 \right] \\
 r = 10 : \quad & J_{10} = \left[ k_{d,10} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) - k_{i,10} \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^3 \right] \\
 r = 11 : \quad & J_{11} = \left[ k_{d,11} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) - k_{i,11} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right] \\
 r = 12 : \quad & J_{12} = \left[ k_{d,12} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) - k_{i,12} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right] \\
 r = 13 : \quad & J_{13} = \left[ k_{d,13} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right)^2 - k_{i,13} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right] \\
 r = 14 : \quad & J_{14} = \left[ k_{d,14} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) - k_{i,14} \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right)^2 \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right] \\
 r = 15 : \quad & J_{15} = \left[ k_{d,15} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) - k_{i,15} \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right)^2 \right]
 \end{aligned}$$

$$r = 16 : \quad J_{16} = \left[ k_{d,16} \left( \frac{\rho_{N_2}}{M_{N_2}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) - k_{i,16} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right]$$

$$r = 17 : \quad J_{17} = \left[ k_{d,17} \left( \frac{\rho_{NO}}{M_{NO}} \right) \left( \frac{\rho_O}{M_O} \right) - k_{i,17} \left( \frac{\rho_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \left( \frac{\rho_N}{M_N} \right) \right]$$

Maintenant, calculons  $\Delta\nu_{s,r} = \nu''_{s,r} - \nu'_{s,r}$  de chaque espèce pour chaque réaction :

$r = 1$	:	$\Delta\nu_{O_2,1} = -1;$	$\Delta\nu_{N_2,1} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,1} = 0;$	$\Delta\nu_{O,1} = 2;$	$\Delta\nu_{N,1} = 0$
$r = 2$	:	$\Delta\nu_{O_2,2} = -1;$	$\Delta\nu_{N_2,2} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,2} = 0;$	$\Delta\nu_{O,2} = 2;$	$\Delta\nu_{N,2} = 0$
$r = 3$	:	$\Delta\nu_{O_2,3} = -1;$	$\Delta\nu_{N_2,3} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,3} = 0;$	$\Delta\nu_{O,3} = 2;$	$\Delta\nu_{N,3} = 0$
$r = 4$	:	$\Delta\nu_{O_2,4} = -1;$	$\Delta\nu_{N_2,4} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,4} = 0;$	$\Delta\nu_{O,4} = 2;$	$\Delta\nu_{N,4} = 0$
$r = 5$	:	$\Delta\nu_{O_2,5} = -1;$	$\Delta\nu_{N_2,5} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,5} = 0;$	$\Delta\nu_{O,5} = 2;$	$\Delta\nu_{N,5} = 0$
$r = 6$	:	$\Delta\nu_{O_2,6} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,6} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,6} = 0;$	$\Delta\nu_{O,6} = 0;$	$\Delta\nu_{N,6} = 2$
$r = 7$	:	$\Delta\nu_{O_2,7} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,7} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,7} = 0;$	$\Delta\nu_{O,7} = 0;$	$\Delta\nu_{N,7} = 2$
$r = 8$	:	$\Delta\nu_{O_2,8} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,8} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,8} = 0;$	$\Delta\nu_{O,8} = 0;$	$\Delta\nu_{N,8} = 2$
$r = 9$	:	$\Delta\nu_{O_2,9} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,9} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,9} = 0;$	$\Delta\nu_{O,9} = 0;$	$\Delta\nu_{N,9} = 2$
$r = 10$	:	$\Delta\nu_{O_2,10} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,10} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,10} = 0;$	$\Delta\nu_{O,10} = 0;$	$\Delta\nu_{N,10} = 2$
$r = 11$	:	$\Delta\nu_{O_2,11} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,11} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,11} = -1;$	$\Delta\nu_{O,11} = 1;$	$\Delta\nu_{N,11} = 1$
$r = 12$	:	$\Delta\nu_{O_2,12} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,12} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,12} = -1;$	$\Delta\nu_{O,12} = 1;$	$\Delta\nu_{N,12} = 1$
$r = 13$	:	$\Delta\nu_{O_2,13} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,13} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,13} = -1;$	$\Delta\nu_{O,13} = 1;$	$\Delta\nu_{N,13} = 1$
$r = 14$	:	$\Delta\nu_{O_2,14} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,14} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,14} = -1;$	$\Delta\nu_{O,14} = 1;$	$\Delta\nu_{N,14} = 1$
$r = 15$	:	$\Delta\nu_{O_2,15} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,15} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,15} = -1;$	$\Delta\nu_{O,15} = 1;$	$\Delta\nu_{N,15} = 1$
$r = 16$	:	$\Delta\nu_{O_2,16} = 0;$	$\Delta\nu_{N_2,16} = -1;$	$\Delta\nu_{NO,16} = 1;$	$\Delta\nu_{O,16} = -1;$	$\Delta\nu_{N,16} = 1$
$r = 17$	:	$\Delta\nu_{O_2,17} = 1;$	$\Delta\nu_{N_2,17} = 0;$	$\Delta\nu_{NO,17} = -1;$	$\Delta\nu_{O,17} = -1;$	$\Delta\nu_{N,17} = 1$

- Pour l'espèce  $O_2$  :

$$\omega_{c,O_2} = M_{O_2} \times \sum_{r=1}^{17} \Delta\nu_{O_2,r} \times J_r = M_{O_2} \times (-J_1 - J_2 - J_3 - J_4 - J_5 + J_{17})$$

- Pour l'espèce  $N_2$  :

$$\omega_{c,N_2} = M_{N_2} \times \sum_{r=1}^{17} \Delta\nu_{N_2,r} \times J_r = M_{N_2} \times (-J_6 - J_7 - J_8 - J_9 - J_{10} - J_{16})$$

- Pour l'espèce  $NO$  :

$$\begin{aligned} \omega_{c,NO} &= M_{NO} \times \sum_{r=1}^{17} \Delta\nu_{NO,r} \times J_r \\ &= M_{NO} \times (-J_{11} - J_{12} - J_{13} - J_{14} - J_{15} + J_{16} - J_{17}) \end{aligned}$$

- Pour l'espèce  $O$  :

$$\begin{aligned} \omega_{c,O} &= M_O \times \sum_{r=1}^{17} \Delta\nu_{O,r} \times J_r \\ &= M_O \times (2J_1 + 2J_2 + 2J_3 + 2J_4 + 2J_5 + J_{11} + J_{12} + J_{13} + J_{14} + \\ &\quad + J_{15} - J_{16} - J_{17}) \end{aligned}$$



- Pour l'espèce  $N$ :

$$\begin{aligned}\omega_{c,O} &= M_N \times \sum_{r=1}^{17} \Delta\nu_{N,r} \times J_r \\ &= M_N \times (2J_6 + 2J_7 + 2J_8 + 2J_9 + 2J_{10} + J_{11} + J_{12} + J_{13} + J_{14} + \\ &\quad + J_{15} + J_{16} + J_{17})\end{aligned}$$

## APPENDICE B

### LES COEFFICIENTS DES CONSTANTES DE VITESSE DIRECTES ET LES CONSTANTES D'EQUILIBRE

#### B.1 Les constantes de vitesse directes :

Les vitesses des réactions chimiques directes et inverse  $k_d$  et  $k_i$  en ( $cm^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$ ) et ( $cm^6 \cdot mol^{-2} \cdot s^{-1}$ ) respectivement. Elles sont déterminées par :

$$k_{d,r} = C_r \cdot T^{n_r} \cdot \exp\left(-\frac{\theta_{d,r}}{T}\right)$$

$$k_{i,r} = \frac{k_{d,r}}{k_{eq,r}}$$

$\theta_{d,r}$  : est la température caractéristique de dissociation pour la réaction  $r$ .

$k_{eq,r}$ : est la constante d'équilibre pour la réaction  $r$ .

Il existe des différents modèles qui donnent les coefficients des constantes précédentes. Dans cette étude, on a choisi les deux modèles ; de PARK 1990 et de GARDINER.

#### B.1.1. Modèle de PARK 1990 :

Tableau B.1: coefficients de la constante de vitesse directe.

Réactions	$C_r$	$n_r$	$\theta_{d,r}$
$r = 1$	$9.68 \times 10^{22}$	-2.0	59750
$r = 2$	$9.68 \times 10^{22}$	-2.0	59750
$r = 3$	$9.68 \times 10^{22}$	-2.0	59750
$r = 4$	$2.90 \times 10^{23}$	-2.0	59750
$r = 5$	$2.90 \times 10^{23}$	-2.0	59750
$r = 6$	$3.70 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 7$	$3.70 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 8$	$4.98 \times 10^{22}$	-1.6	113200
$r = 9$	$4.98 \times 10^{22}$	-1.6	113200
$r = 10$	$1.60 \times 10^{22}$	-1.6	113200
$r = 11$	$7.95 \times 10^{23}$	-2.0	75510
$r = 12$	$7.95 \times 10^{23}$	-2.0	75510
$r = 13$	$7.95 \times 10^{23}$	-2.0	75510
$r = 14$	$7.95 \times 10^{23}$	-2.0	75510
$r = 15$	$7.95 \times 10^{23}$	-2.0	75510
$r = 16$	$6.44 \times 10^{17}$	-1.0	38370
$r = 17$	$8.37 \times 10^{12}$	0.0	19450

### B.1.2. Le modèle de GARDINER :

Tableau B.2 : Coefficients des constantes de vitesse directes.

Réactions	$C_r$	$n_r$	$\theta_{d,r}$
$r = 1$	$1.64 \times 10^{19}$	-1.0	59380
$r = 2$	$3.64 \times 10^{18}$	-1.0	59380
$r = 3$	$1.82 \times 10^{18}$	-1.0	59380
$r = 4$	$4.56 \times 10^{19}$	-1.0	59380
$r = 5$	$1.82 \times 10^{18}$	-1.0	59380
$r = 6$	$1.40 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 7$	$3.70 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 8$	$1.40 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 9$	$1.40 \times 10^{21}$	-1.6	113200
$r = 10$	$1.60 \times 10^{22}$	-1.6	113200
$r = 11$	$4.00 \times 10^{20}$	-1.5	75510
$r = 12$	$4.00 \times 10^{20}$	-1.5	75510
$r = 13$	$8.00 \times 10^{20}$	-1.5	75510
$r = 14$	$8.00 \times 10^{20}$	-1.5	75510
$r = 15$	$8.00 \times 10^{20}$	-1.5	75510
$r = 16$	$1.82 \times 10^{14}$	0.0	38370
$r = 17$	$3.80 \times 10^{09}$	1.0	20820

### B.2. Les constantes d'équilibre :

Les constantes d'équilibre sont données par le modèle de PARK sous la forme suivante :

$$k_{eq,r} = \exp(C_{0,r} + C_{1,r} \cdot Z + C_{2,r} \cdot Z^2 + C_{3,r} \cdot Z^3 + C_{4,r} \cdot Z^4)$$

Avec :  $Z = 10000/T$

Le tableau suivant donne les coefficients  $C_{0,r}$  à  $C_{4,r}$  pour chaque réaction  $r$ .

Tableau B.3 : Coefficients des constantes d'équilibre.

Réactions	$C_{0,r}$	$C_{1,r}$	$C_{2,r}$	$C_{3,r}$	$C_{4,r}$
$r = 1$ à 5	1.335	-4.127	-0.616	0.093	-0.005
$r = 6$ à 10	3.898	-12.611	0.683	-0.118	0.006
$r = 11$ à 15	1.549	-7.784	0.228	-0.043	0.002
$r = 16$	2.349	-4.828	0.455	-0.075	0.004
$r = 17$	0.215	-3.658	0.843	-0.136	0.007

## APPENDICE C

### LES CONSTANTES ET PROPRIETES THERMODYNAMIQUES

#### C.1. Constantes de l'air

On trouve dans le tableau ci-dessous, les masses molaires, les valeurs des enthalpies de formation massique ainsi que des températures caractéristiques de vibration des espèces moléculaires.

Tableau C.1 : Masses molaires, enthalpies de formation et températures caractéristiques de vibration.

Espèces	$M_s$ (Kg)	$h_s^0$ (J · Kg <sup>-1</sup> )	$\theta_{v,s}$ (K)
$N_2$	$28 \times 10^{-3}$	0.0	3392
$O_2$	$32 \times 10^{-3}$	0.0	2240
NO	$30 \times 10^{-3}$	$2.996123 \times 10^6$	2688
O	$16 \times 10^{-3}$	$1.543119 \times 10^7$	–
N	$14 \times 10^{-3}$	$3.362161 \times 10^7$	–

#### C.2. Les coefficients des polynômes de $C_p$

Les expressions des polynômes pour le calcul de la chaleur spécifique à pression constante de l'espèce, sont données sous la forme polynomiale suivante :

$$C_p = \begin{cases} A_1 + A_2 \cdot T + A_3 \cdot T^2 + A_4 \cdot T^3 + A_5 \cdot T^4 & 300 \leq T \leq 1000 \\ B_1 + B_2 \cdot T + B_3 \cdot T^2 + B_4 \cdot T^3 + B_5 \cdot T^4 & 1000 \leq T \leq 5000 \end{cases}$$

Ces constantes sont issues de la référence (ANSYS Help)

Tableau C.2 : Les coefficients des polynômes de  $C_p$

	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$
$O_2$	834.826477	0.292958	$-1.495637 \times 10^{-04}$	$3.413885 \times 10^{-07}$	$-2.2783584 \times 10^{-10}$
$N_2$	979.0429	0.41796389	$-1.176279 \times 10^{-03}$	$1.674394 \times 10^{-06}$	$-7.256297 \times 10^{-10}$
NO	935.6001	0.347209	$-9.15153 \times 10^{-04}$	$1.44579 \times 10^{-06}$	$-6.778306 \times 10^{-10}$
O	1531.1577	-0.85129899	$1.2581 \times 10^{-04}$	$-8.329426 \times 10^{-07}$	$2.021861 \times 10^{-10}$
N	1485.8164	-0.01294	$3.2176118 \times 10^{-05}$	$-3.3523769 \times 10^{-08}$	$1.246498 \times 10^{-11}$

	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>3</sub>	B <sub>4</sub>	B <sub>5</sub>
O <sub>2</sub>	960.7523	0.15941	-3.270885×10 <sup>-05</sup>	4.6127648×10 <sup>-09</sup>	-2.952832×10 <sup>-13</sup>
N <sub>2</sub>	868.6229	0.4416295	-1.6872×10 <sup>-04</sup>	2.9967875×10 <sup>-08</sup>	-2.004385×10 <sup>-12</sup>
NO	899.2721	0.3516634	-1.3898×10 <sup>-04</sup>	2.540701×10 <sup>-08</sup>	-1.738845×10 <sup>-12</sup>
O	1321.02087	-0.0143171	-1.6124203×10 <sup>-06</sup>	2.3650335×10 <sup>-09</sup>	-2.269926×10 <sup>-13</sup>
N	1454.4726	0.0632861	-4.4314045×10 <sup>-05</sup>	1.115756×10 <sup>-08</sup>	-6.090213×10 <sup>-13</sup>

### C.3. Efficacité de l'élément-tiers

Tableau C. 3 : Efficacité de l'élément-tiers

<i>M</i>	Dissociation de O <sub>2</sub>	Dissociation de N <sub>2</sub>	Dissociation de NO
O <sub>2</sub>	0.2	0.233	0.05
N <sub>2</sub>	0.2	0.233	0.05
NO	0.2	0.233	1
O	1	1	1
N	1	1	1

### C.4. Les paramètres de Lennard-Jones

Tableau C.4 : Les paramètres de Lennard-Jones

	$\sigma$ [Å]	$\varepsilon/k_B$ [K]
O <sub>2</sub>	3.467	106.7
N <sub>2</sub>	3.798	71.4
NO	3.492	116.7
O	3.050	106.7
N	3.298	71.4



## Bibliographie

- [1] Jr. John D. Anderson, "*Hypersonic and High-Temperature*", 2006.
- [2] Jr. John D. Anderson, "*Fundamentals Of Aerodynamics*", New York: McGraw-Hill Higher education, 2001.
- [3] André.L.JAUMOTTE, "*Chocs et Ondes de Choc*", Tome 2.MASSON, 1973.
- [4] Raymond Brun, "*High Temperature Phenomena in Shock Waves*". Springer, 2012.
- [5] Jean-François SINI, "*Mécanique des fluides*", 2008.
- [6] Ernest Heinrich Hirschel, "*Basics of aerothermodynamics.*", Springer.
- [7] INGE L.RYHMING, "*Dynamique des fluides*".: Presses polytechniques et universitaires romandes, 2004.
- [8] Teller E. Landau.L, "*Theory of Sound Dispersion*".: Phys.z.Sowjet,1936.
- [9] Raymond P. Canale Steven C. Chapra, "*Numerical Methods for Engineer*", 6th ed., 2010.
- [10] Dominique Thévenin. "*Etude et analyse des écoulements compressibles*". 2004, Octobre
- [11] Walter G. Vincenti, "*Introduction to physical gas dynamics.*".: Krieger publishing company, 1965.
- [12] David C. Wilcox, "*Turbulence Modeling for CFD*". California, Canada : DCW InDustries, Inc, 1994.
- [13] R.Glowinski, J.Périaux J.-A Désidéri, "*Hypersonic Flows for Reentry Problems*"., 1990, vol. Volum 2: Test Cases-Experiments and Computations.
- [14] ALLOUCHE Rachid, "*Simulation numérique des effets de la radiation sur les paramètres thermochimiques derrière une onde de choc*",Thèse de Doctorat,Spécialité: Thermo-Energétique, U.S.T.H.B,2014.
- [15] Kossi Koffi-KPANTE, "*Etude des phénomènes déséquilibre thermochimique dans la couche de choc radiative de l'atmosphère simulee de TITAN*". AIX-MARSEILLE 1: Thèse de doctorat, 1996.
- [16] Sanjeev Kumar, "*Numerical Simulation of Chemically Reactive Hypersonic Flows.*", 2005.
- [17] Yann MARCHESSE, "*Modélisation de la turbulence - Application à la CFD*", département de Mécanique et Energétique, Ecole Catholique d'Arts et Métiers - Lyon,

2010.

- [18] Naoual BELOUAGGADIA, "*Modélisation de l'interaction vibration-dissociation dans un écoulement réactif*". Thèse Doctorat, Spécialité: Mécanique-Energétique, Université de Provence, Marseille, 1998.
- [19] Eric SCHALL, "*Contribution numérique à l'étude des écoulements dissipatifs externes hypersoniques*", Thèse de doctorat, Spécialité: Mécanique-Energétique, UNIVERSITE DE PROVENCE, 1995.
- [20] Tristan SOUBRIE, "*Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans la modélisation des écoulements de rentrée terrestre et martienne*", Thèse de doctorat, UNIVERSITE DE PROVENCE, 2006.
- [21] Chul Park, "*Modeling of hypersonic reacting flows*," NASA Ames Research Center.
- [22] Chul Park, "*Nonequilibrium hypersonic aerothermodynamics*." : Wiley Interscience, 1990.
- [23] Chul Park, "*The Limits of Two-Temperature Model*," Korea Advanced Institute of Science and Technology, 2010.
- [24] Chul Park, "*Validation of Multitemperature nozzle flow code*," Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1995.
- [25] A. BOULAHIA, "*Couches limites hypersoniques dans des écoulements visqueux en déséquilibre chimique*." , Thèse de Doctorat, Département de Physique, Université Mentouri, Constantine.
- [26] John Murray Anderson, "*Numerical Simulation Of Imperfect Gas Flows*". the University of Glasgow, 1992.
- [27] Paul V. Marrone Charles E. Treanor, "*Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Relaxation*," Physics of Fluids, Septembre 1962.
- [28] Maria Vitoria SALVETTI, Jean-Antoine DESIDERI Cyril GORART, "*Etude numérique de modèles thermochimiques couplés pour les écoulements hypersoniques eulériens*" : INRIA, 1994.
- [29] Ahn Furudate, "*Calculation of shock stand-off distance for a sphere in nonequilibrium hypersonic flow*," Journal of Computational Fluids Engineering, 2012.
- [30] Tahir Gökçen, "*Computation of Thermochemical Nonequilibrium Flows Around a Simple and a Double Ellipse*" : Eloret Institute, Aerothermodynamics Branch, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA 94035.

- [31] White D.R Millikan R.C., "*Systematics of vibrational relaxation*".: The journal of chemical physics, 1963.
- [32] R.N. Gupta, and J.L. Shinn. P.A. Gnoffo, "*Conservation Equations and Physical Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium*".: NASA TP-2867, 1989.
- [33] Ethirajan Rathakrishnan, "*High Enthalpy Gas Dynamics*." India: John Wiley & Sons Singapore Pte. Ltd.
- [34] J.Douglas Faires Richard L.Burden, "*Numerical Analysis*".: CENGAGE Learning, 2010.
- [35] W.W.Liou, A.Shabbir, Z.Yang, J.Zhu T.-H. Shih, "*A New k-e Eddy Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows-Model Development and Validation*," NASA Technical Memorandum 106721, 1994.
- [36] "*ANSYS Help14.5*".
- [37] ANSYS 13.0 Tutorial, "*Customer Training Material*".: ANSYS Inc, 12/2010.

## Simulation numérique d'un écoulement hypersonique autour d'un corps émoussé de type nez de navette spatiale

Nabil GHENDOUR<sup>1</sup>, Samir OUCHENE<sup>2</sup>, Rachid ALLOUCHE<sup>3</sup>, Rachid RENANE<sup>4\*</sup>

<sup>1234</sup> Laboratoire de science de l'aéronautique, Institut d'aéronautique et des études spatiales, Université SAAD DAHLEB de Blida1 Algérie.

\*Auteur correspondant : r.renane@yahoo.fr

### Résumé :

Le but de ce travail est de simuler numériquement un écoulement hypersonique bidimensionnel en hors équilibre chimique autour d'un corps émoussé de type nez de navette spatiale. Dans cette contribution on a focalisé sur le comportement de l'écoulement réactif et les phénomènes physico-chimiques qui prennent naissance en aval de l'onde de choc intense qui apparait en amont de l'obstacle, ainsi localiser l'onde de choc et étudier la couche de choc pour déterminer le champ de pression, de température et l'évolution des fractions massiques des espèces autour de l'obstacle. Le modèle mathématique est basé sur la résolution des équations de Navier Stokes où le modèle de turbulence k-w est choisi. Le logiciel ANSYS Fluent 14.5 est utilisé pour réaliser ce travail. Les résultats obtenus corroborent avec ceux de la littérature scientifique.

**Mots clés :** Ecoulement hypersonique, hors-équilibre chimique, l'onde de choc, ANSYS Fluent

### Nomenclatures :

$M$	catalyseur	<i>Symboles grecs</i>	
$M_s$	la masse molaire	$\rho$	la masse volumique
$u$	la vitesse selon $x$	$\omega_c$	terme source chimique
$v$	la vitesse selon $y$	$\nu$	coefficient stœchiométrique
$u_{Ds}$	la vitesse de diffusion selon $x$	$\theta_d$	la températures de dissociation
$v_{Ds}$	la vitesse de diffusion selon $y$	$\tau$	le tenseur des contraintes visqueuses
$P$	la pression	$\mu$	la viscosité
$T$	la température	$\mu_T$	la viscosité turbulente
$E$	l'énergie total	$\omega$	dissipation effective
$k_d$	la vitesse de réaction direct	$\Gamma$	diffusivité effective
$k_i$	la vitesse de réaction inverse	Indices et exposants	
$C$	constants de loi d'ARRHENIUS	$s$	espèce
$n$	constants de loi d'ARRHENIUS	$r$	réaction
$k$	énergie cinétique turbulente		

### 1 Introduction :

Lorsqu'un corps de forme émoussée (sonde, navette, capsule...) rentre à grande vitesse dans une atmosphère planétaire, un choc fort et détaché se forme en amont du corps, on appelle couche de choc la zone d'écoulement située entre le choc et la paroi. A la traversée du choc, le fluide se trouve brusquement comprimé et ralenti, sur une distance de l'ordre du libre



parcours moyen [1], une part importante de l'énergie cinétique est convertie en énergie interne. Par conséquent, la température croit brutalement derrière l'onde de choc. La couche de choc est le siège d'intenses processus physico-chimiques, appelés effets haute température ou effets de gaz réel. L'élévation de température renforce l'agitation moléculaire. Les collisions entre les particules de gaz sont plus nombreuses et plus violentes, suffisamment pour exciter le mode de vibration des molécules, entraîner leur dissociation et même l'ionisation du gaz. Dans notre travail, nous avons opté d'étudier la résolution des équations de Navier-Stokes pour un écoulement bidimensionnel (plan et axisymétrique), visqueux, en déséquilibre chimique en utilisant le solveur Fluent. Nous avons par ailleurs fait l'hypothèse d'un écoulement à l'équilibre vibrationnel, les phénomènes d'ionisation ont été négligés : pour des vitesses amont jusqu'à 6000ms<sup>-1</sup>, le rayonnement ne devient important qu'à partir de 8000 ms<sup>-1</sup> [2], et ne pourra être étudié ici. L'air est donc considéré comme un mélange de cinq gaz parfaits (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N, O, NO) en déséquilibre chimique.

## 2 Le modèle mathématique

### 2.1 Conservation des espèces :

La conservation de masse de l'espèce  $s$  est donnée par :

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_s u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_s v)}{\partial y} = -\frac{\partial(\rho_s u_{Ds})}{\partial x} - \frac{\partial(\rho_s v_{Ds})}{\partial y} + \omega_{c,s} \quad (1)$$

### 2.2 L'équation de continuité

La conservation de la masse totale du mélange est la somme des équations de conservation de masse de chaque espèce  $s$ , l'équation de continuité globale du mélange peut s'écrire:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

### 2.3 Conservation de la quantité de mouvement

La sommation des équations de quantité de mouvement élémentaires conduit à :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u^2 + P)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} &= -\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \\ \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2 + P)}{\partial y} &= -\frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \end{aligned} \quad (3)$$

Avec  $\tau$  est le tenseur des contraintes visqueuses connu pour les équations de Navier – Stokes sous la formulation suivante [2] :

$$\tau_{ij} = -\mu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( \sum_{k=1}^k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \right) \quad (4)$$

### 2.4 Conservation de l'énergie totale

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

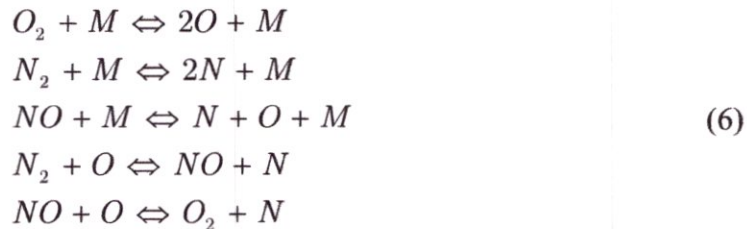


$$\frac{\partial[u(E+P)]}{\partial x} + \frac{\partial[v(E+P)]}{\partial y} = -\frac{\partial\phi_x}{\partial x} - \frac{\partial\phi_y}{\partial y} - \frac{\partial(u\tau_{xx} + v\tau_{xy})}{\partial x} - \frac{\partial(u\tau_{yx} + v\tau_{yy})}{\partial y} \quad (5)$$

Tel que,  $E$  est l'énergie total du mélange et  $\phi$  le flux de chaleur.

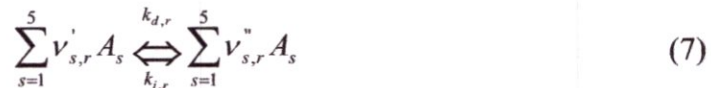
## 2.5 Le modèle de la cinétique chimique :

L'excitation des molécules immédiatement derrière l'onde de choc se traduit par la dissociation de celles-ci due à l'importance de la température qui règne dans la couche de choc. Dans les conditions standards, l'atmosphère terrestre est supposé être un mélange binaire de 21% de  $O_2$  et 79% de  $N_2$ , derrière l'onde de choc normale, ces espèces se dissocient en formant de nouvelles espèces, alors l'air se présente comme un mélange réactif des espèces:  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ . les réactions peuvent être écrite sous une forme plus compacte, en considérant le catalyseur qui peut être l'une quelconque des cinq espèces ( $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ ), ce corps catalytique n'apporte rien à la réaction, son rôle étant simplement de permettre la réaction de dissociation ou de recombinaison ainsi l'ensemble des réactions chimiques élémentaires peut s'écrire [3,4] :



## 2.6 Taux de production des espèces chimiques :

La forme générale des réactions induites par l'ensemble des espèces chimiques s'écrit [5] :



Où  $k_{d,r}$  et  $k_{i,r}$  représentent la vitesse de réaction directe et inverse respectivement de la réaction  $r$ . Le taux de production massique de l'espèce  $s$  par unité de volume est donné par :

$$\omega_c = M_s \sum_{r=1}^{17} (v''_{s,r} - v'_{s,r}) \left[ k_{d,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{v'_{s,r}} - k_{i,r} \prod_{s=1}^5 \left( \frac{\rho_s}{M_s} \right)^{v''_{s,r}} \right] \quad (8)$$

Le FLUENT utilise l'expression donnée par la loi d'ARRHENIUS pour calculer la constant de vitesse direct [6,7]. L'expression d'ARRHENIUS est donnée par:

$$k_{d,r} = C_r T^{n_r} e^{-\theta_{d,r}/T} \quad (9)$$

les constantes  $C_r$ ,  $n_r$  et les températures de dissociation  $\theta_{d,r}$  pour chaque réaction sont données par Park « modèle de Park 1995 » [8].

## 2.7 Modèle de fermeture $k\omega$ :

Ce modèle a été proposé par Wilcox en 1988 [8] et repose sur l'utilisation d'une échelle caractéristique des gros tourbillons,  $\omega = \varepsilon/k$ , et sur la même linéarité entre la viscosité turbulente et le cisaillement du champ moyen. La viscosité turbulente est donnée dans ce cas par la relation suivante :

$$\mu_T = \alpha \frac{\rho k}{\omega} \quad (10)$$

où  $\alpha$  est un coefficient permettant de diminuer l'influence de la viscosité turbulente. Les équations de transport pour  $k$  et  $\omega$  sont respectivement [9] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega \end{aligned} \quad (11)$$

Dans ces deux équations de transport,  $G$  représente la génération d'énergie cinétique turbulente ou de la dissipation effective, selon l'indice utilisé, due au gradient de vitesse moyenne.  $\Gamma_k$  et  $\Gamma_\omega$  représentent la diffusivité effective de  $k$  et  $\omega$ , respectivement.  $Y_k$  et  $Y_\omega$  représentent la dissipation de  $k$  et  $\omega$  par la turbulence.

### 3 Conditions initiales

Notre objet est de simuler les expériences de Lobb [10] réalisées sur un corps de type sphère-cône. Le rayon de la sphère est de  $R = 6.35\text{mm}$  et la longueur du cylindre est de  $1.3\text{m}$ . Les pression et température amont valent respectivement  $664\text{Pa}$  et  $293\text{K}$ , le nombre de Mach étant de  $15.35$ . La température moyenne de la paroi est de  $1000\text{K}$ . La paroi est supposée non-catalytique [1].

#### 3.1 Maillage

Le maillage initial est généré par ANSYS Meshing (Figure 1 et Figure 2), après avoir eu les résultats de maillage initial et pour bien localiser l'onde de choc et obtenir un bon résultat, nous avons adapté le maillage dans Fluent (Figure 3) par raffinement des zones à fort gradient. Le tableau 1 montre les étapes d'adaptation du maillage initial et le nombre de maille de chaque maillage.

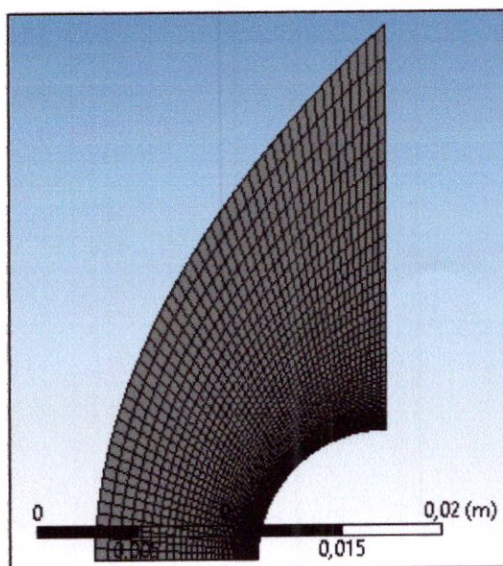


Figure 1 : Maillage initial 50\*50 (Meshing)

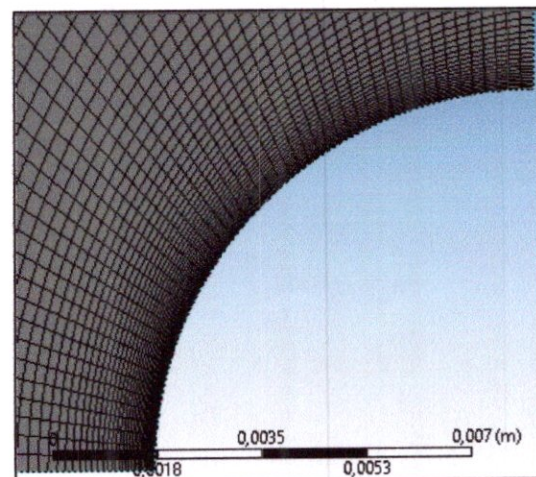


Figure 2 : Maillage initial autour de sphère



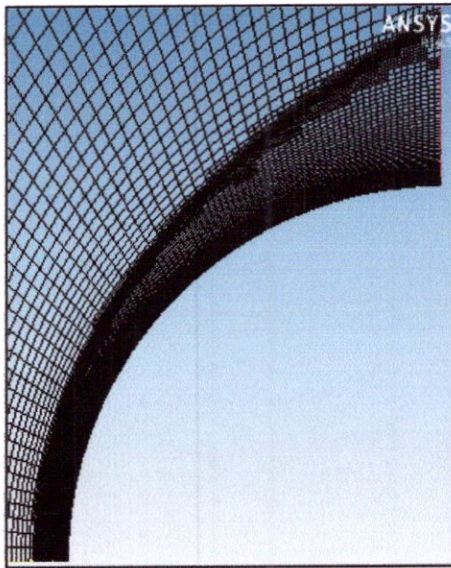


Figure 3 : Maillage adapté (Fluent)

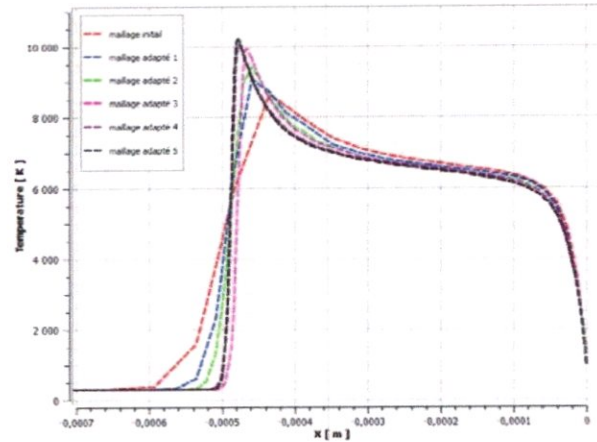


Figure 4 : la température le long de la ligne d'arrêt pour chaque maillage

Tableau 1 : Les Maillages utilisés

Maillage	N° de maille	Température max (K)
Initial	2500	8605
Adapté 1	3052	9190
Adapté 2	5002	9579
Adapté 3	11488	9861
Adapté 4	36694	10105
Adapté 5	138256	10210

#### 4 Les résultats et commentaires :

##### 4.1 Etude de sensibilité de maillage

Pour montrer l'influence de raffinement du maillage sur les calculs, nous avons opté de présenter respectivement l'évolution de la température le long de la ligne d'arrêt du maillage initial et les maillages adaptés 1, 2, 3, 4 et 5 sur la figure 4, La figure nous montre que pour le maillage initial, la température varie de la valeur initial 293K à la valeur maximale de 8605K dans une distance de 0.15mm, et chaque fois qu' on adapte le maillage la température maximale augmente et la distance diminue où pour le maillage final « adapté 5 » la température augmente jusqu'à 10210K dans une distance de l'ordre de moins de 0.02mm. A partir du maillage adapté 4, la variation de la température n'est plus constatée lors du raffinement, c'est-à-dire. Même si on raffine plus en plus le maillage, les résultats ne sont plus dépendants de la solution du maillage, par conséquent, les graphes obtenus sont confondus (ici : maillage adapté 4 et 5) .Donc on peut considérer que le maillage « adapté 4 » est le maillage optimum où le résultat de la température est stable.

##### 4.2 Variation du nombre de Mach de l'écoulement après le choc

La Figure 5 représente les lignes iso-Mach, la figure montre un chute sur la valeur de nombre de mach juste après l'onde de choc, tel que dans la partie avant du sphère autour de l'axe de symétrie, le nombre de mach atteint une valeur inférieure à 1, car dans cette zone la paroi est perpendiculaire à l'écoulement, l'onde de choc est considérée comme une onde de choc normale où l'écoulement devient subsonique.



#### 4.3 Variation de la température de l'écoulement après le choc

La figure 6 montre une augmentation brusque de la température en aval de l'onde de choc, puis elle diminue jusqu'à la paroi, et cela est due à l'apparition des phénomènes physico-chimiques (vibrations des molécules, les réactions de dissociation et d'ionisations) qui sont des phénomènes endothermiques. On constate aussi que les valeurs maximales de température sont aux alentours de 10000K juste après l'onde de choc puis elle diminue jusqu'à l'équilibre. Cela est clairement présenté sur la figure 7 où le choc est positionné à une distance de 0.51mm sur la ligne d'arrêt et aussi on remarque que la température derrière l'onde de choc est très importante (10100K), puis elle diminue jusqu'à atteindre la température d'équilibre (6000K). En comparant notre résultat de la figure 7 avec celui de Tristan, on remarque une bonne concordance entre les deux résultats en termes d'allure et en terme quantitatif.

#### 4.4 Variation de champ de pression dans la zone de relaxation

Concernant le champ de pression (figure 9), on constate une grande pression plus de 20000Pa dans la partie avant de corps, ou bien dans la zone de relaxation, cela est due au freinage de l'écoulement engendré par le choc et par les phénomènes physico-chimiques. Et en comparant notre résultat de la figure 9 avec celui de Tristan de la figure 10, on remarque une excellente similitude entre les deux résultats pour les différentes zones d'isobare dans la plage de relaxation.

#### 4.5 Les fractions massiques des espèces :

Sur la figure 8 on représente l'évolution des fractions massiques des espèces le long de la plage de relaxation, on observe premièrement la diminution des fractions massique de l'oxygène  $O_2$  et de l'azote  $N_2$ , par contre une augmentation rapide des autres espèces, et on remarque que le  $NO$  atteint une valeur maximale de 0.063 à une distance de 0.421m de la paroi et commence à se dissocier, on remarque que à l'équilibre thermique, la production des espèces se stabilise et atteint des valeurs presque constants. Pour la validation de nos résultats de la figure 11, on remarque un très bon accord avec ceux de Trisan en terme de taux production de différents espèces chimiques dans la plage de relaxation.

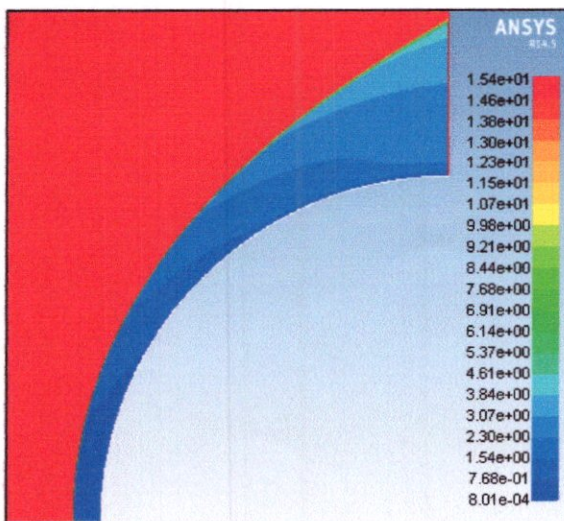


Figure 5 : Nombre de Mach le long de la plage de relaxation

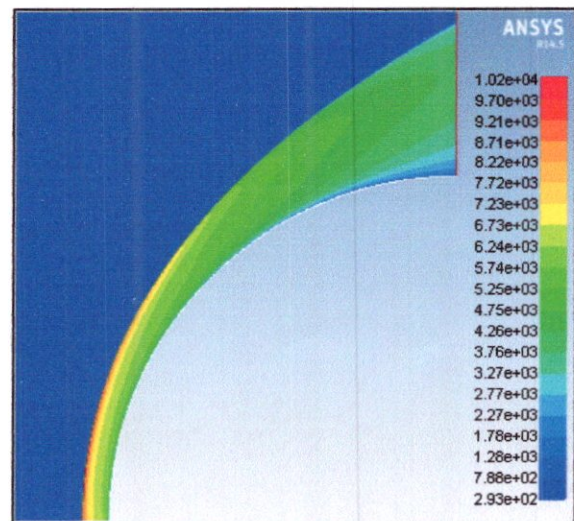


Figure 6 : Champ de température le long de la plage de relaxation



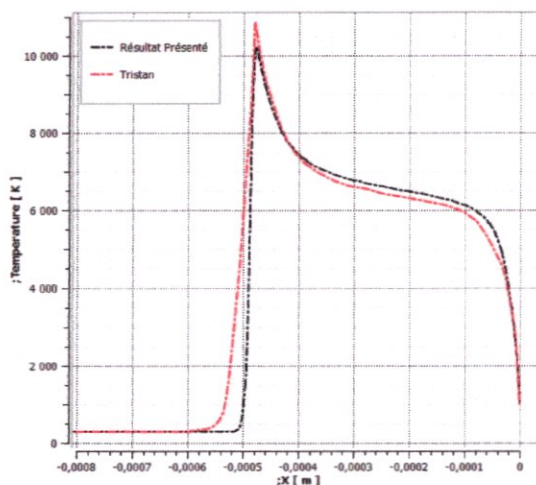


Figure 7 : Variation de la température le long de la plage de relaxation.

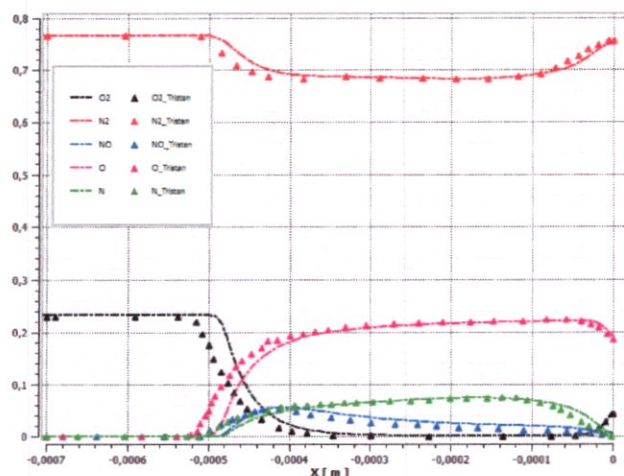


Figure 8 : les fractions massique le long de la plage de relaxation.

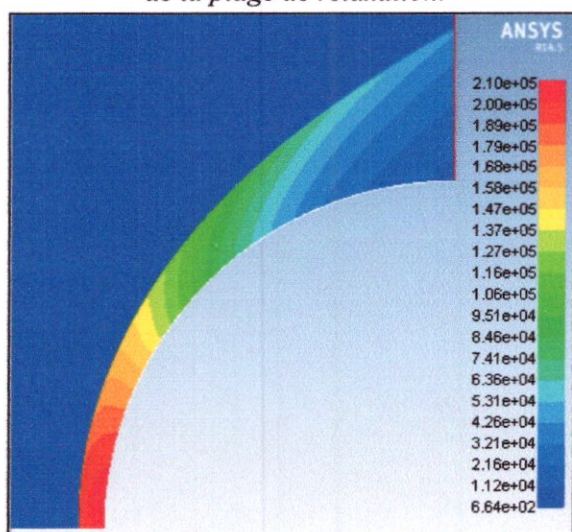


Figure 9 : Variation de champ de pression le long de plage de relaxation (Nos Résultats)

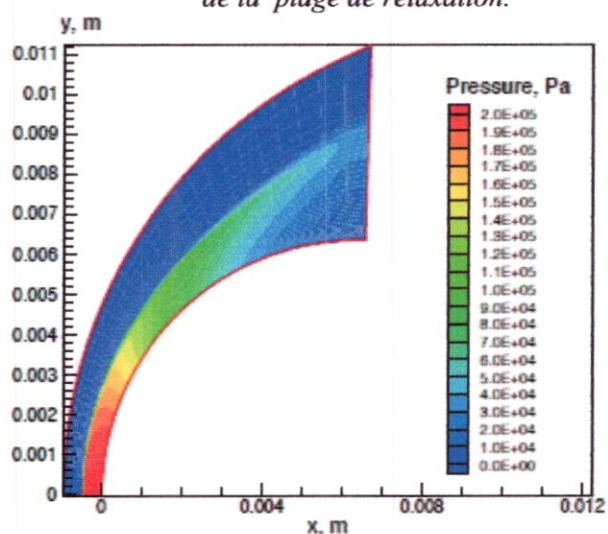


Figure 10 : Variation de champ de pression le long de la plage de relaxation par Tristan

## 5 Conclusion

Cette étude consacrée à la simulation numérique d'un écoulement hypersonique en hors équilibre chimique autour d'un corps arrondi, rencontré dans les rentrées atmosphérique des engins spatiaux, ce dernier est gouverné par les équations de Navier-Stocks couplé avec l'équation de conservation d'espèces. Ce travail a été réalisé à l'aide de logiciel ANSYS 14.5, où on a pu localiser la position de l'onde de choc par rapport à l'obstacle, cette dernière est de l'ordre de  $0.552 \pm 0.032$  mm, résultat très proche du résultat expérimentale ref [10], en outre on pu simuler le comportement de l'écoulement dans la plage de relaxation et déterminer les différents paramètres à savoir le nombre de Mach le champ de pression et de température ainsi les fractions massiques. La variation de ces paramètres est influencée par la création de l'onde de choc en amont de l'obstacle aussi bien par l'apparition des phénomènes physico-chimiques qui ont la nature endothermique et qui forment un bouclier thermique protectif de la paroi. En fin nos résultats sont comparés avec ceux de la littérature scientifique spécialisée, on remarque une bonne concordance et corroborent ceux de Tristan SOUBRIE [1].



## Références

1. SOUBRIE Tristan, « Prise en compte de l'ionisation et du rayonnement dans la modélisation des écoulements de rentrée terrestre et martienne », These de doctorat, ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE L'AERONAUTIQUE ET DE L'ESPACE, 2006.
2. A. Boulahia, M. Belkhiri, M. Afrid -, « Simulation du phénomène de relaxation dans un écoulement réactif parietal derrière un choc fort. », Revue des énergies renouvelables CISM'08 Oum El Bouaghi – Pages 89-102 – 2008.
3. Roberto Vaglio-Laurin, Martin H. Bloom, « Chemical Effects in External Hypersonic Flows”, Numéro 640 de PIBAL report, Polytechnic Institute of New York Department of Aerospace Engineering and Applied Mechanics Volume 1273 de AFOSR (Series), Air Force Office of Scientific Research, United States Air Force, 1961.
4. D'Ambrosio, D., Colonna, G., and Capitelli, M., “Numerical Prediction of Non-Equilibrium Flows in Hypersonic Nozzles: State-to-State Kinetics versus Macroscopic Models,” AIAA Paper 2003-3549, 2003.
5. R. Haoui, A. Gahmousse, D. Zeitoun, “ Chemical and vibrational nonequilibrium flow in a hypersonic axisymmetric nozzle(Ecoulement hors d'équilibre chimique et vibrationnel dans une tuyère hypersonique axisymétrique), “ International Journal of Thermal Sciences, article n° 8 , volume 40, (2001), pp787-795.
6. ANSYS Help14.5.
7. Chul Park. « Validation of Multitemperature Nozzle Flow Code” , NASA Ames Research Center, and Seung-Ho Lee, Eloret Institute (9, 1, p. 9) Article based on AIAA Paper 93-2862
8. Yann MARCHESSE, “Modélisation de la turbulence - Application `a la CFD », Département de Mécanique et `Energétique, Ecole Catholique d'Arts et Métiers – Lyon ; 2010.
9. Celik, Ismail B. “ Introductory Turbulence Modeling”, Lectures Notes, West Virginia University Mechanical & Aerospace Engineering Dept, December 1999.
10. M. Ahn Furudate, « Calculation of shock stand-off distance for a sphere in nonequilibrium hypersonic flow”, Journal of computational fluids engineering 12/2012.