



HAL
open science

Etude numérique de modèles thermochimiques couplés pour les écoulements hypersoniques eulériens

Cyril Godart, Maria-Vittoria Salvetti, Jean-Antoine Desideri

► **To cite this version:**

Cyril Godart, Maria-Vittoria Salvetti, Jean-Antoine Desideri. Etude numérique de modèles thermochimiques couplés pour les écoulements hypersoniques eulériens. [Rapport de recherche] RR-2448, INRIA. 1994. inria-00074227

HAL Id: inria-00074227

<https://inria.hal.science/inria-00074227>

Submitted on 24 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

*Etude numérique de modèles thermo-chimiques couplés
pour les écoulements hypersoniques eulériens*

Cyril GODART, Maria Vittoria SALVETTI, Jean-Antoine DESIDERI

N° 2448

Decembre 1994

PROGRAMME 6



*Rapport
de recherche*

Etude numérique de modèles thermochimiques couplés pour les écoulements hypersoniques eulériens

Cyril GODART, Maria Vittoria SALVETTI, Jean-Antoine DESIDERI

Programme 6 — Calcul scientifique, modélisation et logiciel numérique
Projet SINUS

Rapport de recherche n° 2448 — Decembre 1994 — 45 pages

Résumé : Dans ce travail on étudie l'influence de la modélisation physique du déséquilibre vibratoire sur la simulation numérique d'écoulements hypersoniques non visqueux réactifs. On s'intéresse, en particulier, à l'effet de la vibration sur la cinétique chimique ainsi qu'à l'influence des phénomènes chimiques sur la relaxation vibratoire (couplage CVD et couplage CVDV). L'écoulement hypersonique autour d'un corps arrondi est simulé par une méthode numérique, qui repose sur une formulation Volumes Finis applicable à des maillages non structurés. Un changement de variable dans les équations de relaxation vibratoire est effectué, ce qui permet d'améliorer la robustesse et la précision de la méthode pour les nombres de Mach élevés. Ce problème test nous permet d'effectuer des comparaisons qualitatives des différents modèles. L'influence de la modélisation physique des termes vibratoires sur la structure de la couche de choc devient minime lorsque le nombre de Mach à l'infini amont est très grand.

Mots-clé : hypersonique - déséquilibre chimique - déséquilibre vibratoire - couplage chimie-vibration

(Abstract: pto)

Numerical appraisal of coupled thermochemical models for hypersonic inviscid reacting flow

Abstract: Effects of the physical modelling of vibrational non-equilibrium on the numerical simulation of hypersonic inviscid reacting flows are investigated. The study focuses, in particular, on the coupling between chemical and vibrational phenomena (CVD and CVDV couplings). The hypersonic flow around a blunt body is simulated by a numerical method relying on a Finite-Volume formulation applicable to unstructured grids. The equations of vibrational relaxation are rewritten in different variables in order to improve the robustness and the accuracy of the method for high Mach numbers. This test case allows a qualitative comparison of different models to be made. The effect of physical modelling of the vibrational terms on the shock-layer structure becomes negligible at very high Mach numbers.

Key-words: hypersonics - chemical nonequilibrium - vibrational nonequilibrium - coupling vibration and dissociation

Table des matières

1	Introduction	1
2	Modèle mathématique et physique d'un écoulement en déséquilibre thermo-chimique	2
2.1	Les phénomènes aérodynamiques: les équations d'Euler	2
2.2	Les phénomènes chimiques	3
2.3	Les phénomènes vibratoires.	4
2.4	Les équations constitutives	4
3	Modélisation des termes sources	5
3.1	Termes sources de la chimie	5
3.2	Termes sources de la vibration	6
3.2.1	Modèle de l'oscillateur harmonique à nombre fini de niveaux d'énergie	6
3.2.2	Echanges Vibration-Translation	6
3.2.3	Echanges Vibration-Vibration	7
4	Le couplage chimie-vibration.	7
4.1	Influence de la vibration sur la dissociation: couplage CVD	7
4.2	Influence de la chimie sur la vibration: couplage CVDV	9
5	Nouvelle formulation des équations de vibration	10
5.1	Résultats préliminaires	10
5.2	Nouvelle Formulation	11
5.2.1	Les nouvelles équations	12
5.2.2	Comparaison entre l'ancienne et la nouvelle formulation	13
6	Influence de la modélisation du déséquilibre vibratoire	16
6.1	Ecoulement à Mach 15	16
6.2	Ecoulement à Mach 25	24
A	Conservation des nouvelles variables à travers un choc	32
B	Changement de variable	34
C	Dérivés partielles de la température par rapport aux densités d'espèce:	
	$\frac{\partial T}{\partial \rho_k}$	35
D	Calcul de $\frac{\partial \mathcal{E}_{v,k}}{\partial T}$	36

E	Calcul du jacobien de Ω_v	37
E.1	Le jacobien de Ω_v^{VT}	37
E.2	Le jacobien de Ω_v^{VV}	37
F	Routine <i>Maple</i> pour le calcul des jacobiens	39

1 Introduction

Cette étude s'insère dans le cadre des travaux de modélisation numérique et physique en aérodynamique hypersonique, effectués à l'I.N.R.I.A. Sophia-Antipolis, dont le but est la compréhension et la prédiction quantitative de la structure complexe des écoulements hypersoniques autour des corps de rentrée [6], [7], [9], [10], [4], [14], [17].

Dans la phase la plus critique de la rentrée atmosphérique d'un engin spatial, la vitesse est de l'ordre de plusieurs dizaines de fois la vitesse du son. L'écoulement est alors qualifié d'hypersonique. Le point le plus critique pour l'aérothermodynamique d'une trajectoire typique correspond à une altitude de 75km et à un nombre de Mach de l'ordre de 25. Il se forme un choc détaché en amont de l'engin, à travers lequel l'écoulement subit de très forts effets de compressibilité. L'écoulement, qui possède à l'infini amont une énergie cinétique très élevée, est caractérisé après le choc par des températures de plusieurs dizaines de milliers de degrés Kelvin, c'est à dire par une énergie interne très élevée. Une telle énergie est stockée par les molécules dans leurs modes internes (translation, rotation, excitation électronique, vibration). Si l'énergie stockée par les molécules est suffisamment élevée, des phénomènes de dissociation chimique et d'ionisation se produisent.

Les différents modes de stockage de l'énergie, ainsi que les phénomènes de dissociation et d'ionisation, peuvent être en déséquilibre : leur relaxation vers l'équilibre, caractérisée par un **temps de relaxation**, se réalise grâce aux collisions entre molécules. En fait, les modes de translation et de rotation ont besoin de très peu de collisions pour s'équilibrer : on supposera donc dans toute l'étude l'équilibre translationnel et rotationnel atteints. En revanche, les phénomènes vibratoires et chimiques, pour les écoulements étudiés, sont en général en déséquilibre : leurs temps de relaxation sont du même ordre que le temps caractéristique de transit.

La modélisation des termes de production d'énergie vibratoire est dans le cas d'un mélange réactif extrêmement complexe et elle fait encore à ce jour l'objet de nombreuses recherches [3], [8], [22], [23]. Une telle modélisation doit prendre en compte les phénomènes d'échange entre les différents modes de stockage de l'énergie, notamment les échanges entre énergies de translation et vibration (V-T) et les échanges entre énergies de vibration (V-V). De plus, on remarque que dans le cas d'un mélange gazeux réactif les phénomènes de relaxation chimique et de relaxation vibratoire sont fortement couplés. En effet le déséquilibre vibratoire influence la dissociation chimique, car une molécule excitée vibratoirement se dissocie plus facilement : c'est le couplage vibration-dissociation (CVD). Les phénomènes chimiques à leur tour ont une influence sur la valeur de l'énergie de vibration moyenne 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 vibratoirement qui se dissocient le

plus facilement.

Tous ces phénomènes ont un effet important sur le comportement des grandeurs aéro et thermodynamiques du mélange, ainsi que la charge thermique et aérodynamique des véhicules. Leur compréhension est donc essentielle pour l'étude des écoulements hypersoniques.

On s'intéresse ici, plus précisément, à l'influence de la modélisation du couplage entre les phénomènes chimiques et vibratoires sur la simulation numérique d'écoulements hypersoniques autour de corps arrondis. Cette modélisation s'appuie sur les travaux de Brun et est exposée dans [8].

La méthode numérique employée repose sur une formulation Volumes Finis, utilise des flux numériques décentrés, et peut être appliquée à des maillages non structurés. Dans la première section, on présente en détail la modélisation mathématique et physique du problème, notamment on explicite la modélisation des termes de production de l'énergie vibratoire et du couplage entre la relaxation chimique et vibratoire. On décrit ensuite brièvement la méthode numérique utilisée. Un changement de variable dans les équations de relaxation vibratoire est proposé ensuite, dans le but d'améliorer la robustesse et la précision du schéma. On analyse enfin les résultats obtenus avec différents modèles de phénomènes vibratoires pour l'écoulement hypersonique réactif autour d'un corps arrondis.

2 Modèle mathématique et physique d'un écoulement en déséquilibre thermo-chimique

2.1 Les phénomènes aérodynamiques : les équations d'Euler

Un écoulement compressible non visqueux est régi par les équations d'Euler écrites ici en deux dimensions d'espaces et sous forme conservative :

$$W_t + (F_1(W))_x + (F_2(W))_y = 0 \quad (1)$$

où :

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix} \quad F_1(W) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{pmatrix} \quad F_2(W) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{pmatrix} \quad (2)$$

où ρ est la masse volumique du mélange, u , v les composantes de la vitesse, p la pression et E l'énergie totale par unité de volume. Dans les cas qui nous intéressent, l'air est un mélange gazeux réactif qu'il convient de modéliser en tenant compte des phénomènes thermo-chimiques.

2.2 Les phénomènes chimiques

Dans les conditions normales de température, l'air est composé essentiellement de 79% d'azote et de 21% d'oxygène diatomiques. Cependant, dès que la température augmente (en pratique au delà de 2500 K) les espèces diatomiques O_2 et N_2 réagissent. L'air se présente alors comme un mélange réactif des cinq espèces O , N , NO , O_2 et N_2 , d'espèces ionisées NO^+ , O^+ , N^+ , N^- , O^- et d'électrons libres e^- . Dans cette étude les réactions d'ionisation qui se produisent généralement à très hautes températures seront négligées.

Les réactions chimiques sont le résultat de collisions moléculaires. Si pendant un laps de temps caractéristique du mouvement fluide, un nombre suffisant de collisions, dépendant de l'espèce, se produisent, l'équilibre chimique est atteint. A l'inverse, si les conditions de l'écoulement sont telles qu'aucune réaction n'a le temps de s'amorcer, l'écoulement est dit "figé" ou "gelé". Dans des situations intermédiaires, les réactions chimiques s'amorcent mais n'atteignent pas l'équilibre et l'écoulement est dit hors équilibre. Pour caractériser ces trois types d'écoulement, on est amené à considérer le rapport entre le temps de transit τ_t et le temps de relaxation chimique τ_c , qui dépend du fluide considéré et des conditions à l'infini amont. Ce rapport est le nombre de Damköhler Da :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$$

Pour un écoulement externe typique, il est clair que τ_t étant le rapport d'une longueur caractéristique sur la vitesse caractéristique de l'écoulement, le nombre de Damköhler et les propriétés du fluide réactif dépendent fortement de la géométrie et de la taille du corps [7]. Trois cas sont alors à considérer :

$Da \gg 1$: écoulement à l'équilibre. On peut penser que l'équilibre chimique est atteint instantanément derrière le choc. La composition chimique du gaz est alors déterminée par les lois d'action de masse en fonction des valeurs locales de ρ et T .

$Da \ll 1$: écoulement figé. Ce type d'écoulement est à composition constante.

$Da \sim 1$: écoulement hors équilibre, pour lequel il convient de résoudre les équations de relaxation de la chimie.

Pour des conditions typiques de la rentrée dans l'atmosphère d'une navette spatiale (M_∞ de l'ordre de 25, $T_\infty \simeq 200$ et $p_\infty \simeq 10^{-4} atm$), les temps de relaxation pour la chimie sont du même ordre que le temps de transit. On est donc amené à résoudre des équation de relaxation. On a choisi de résoudre 3 équations de bilan pour les espèces produites :

$$\boxed{(\rho_k)_t + div(\rho_k \vec{V}) = \Omega_{c,k} \quad k = O, N, NO}$$

où $\Omega_{c,k}$ est un terme source dont la modélisation sera décrite plus loin, que l'on complète par les équations de conservation de la masse et de conservation du nombre d'atomes de O et N [9]:

$$\rho_{O_2} = \frac{24}{103}\rho - \rho_O - \frac{8}{15}\rho_{NO}$$

$$\rho_{N_2} = \frac{79}{103}\rho - \rho_N - \frac{7}{15}\rho_{NO}$$

2.3 Les phénomènes vibratoires.

On définit de la même façon que pour les phénomènes chimiques, un nombre de Damköhler de la vibration, Da_v , comme le rapport entre le temps caractéristique de l'écoulement et un temps caractéristique de relaxation vibratoire :

$$Da_v = \frac{\tau_t}{\tau_v}$$

Dans les conditions de rentrée dans l'atmosphère d'une navette spatiale, certaines espèces ont des temps de relaxation vibrationnelle comparable au temps de transit du corps et ne peuvent pas être considérées à l'équilibre thermochimique. Il faut donc résoudre des équations de relaxation vibrationnelle du même type que les équations de relaxation de la section 2.2. Nous ne cherchons pas ici à établir ces équations. Pour ce on se rapportera utilement à Landau-Teller [12], Brun [3], Thivet [23].

$$\boxed{(\rho_k e_{v,k})_t + \text{div}(\rho_k e_{v,k} \vec{V}) = \Omega_{v,k} \quad k = O_2, N_2}$$

où :

ρ_k : est la masse volumique de l'espèce k .

$e_{v,k}$: est l'énergie de vibration par unité de masse de l'espèce k .

$\Omega_{v,k}$: est le terme de production d'énergie de vibration.

On ne résoud pas d'équations de relaxation vibratoire pour NO . En effet, les molécules de NO ont besoin de très peu de collisions pour être à l'équilibre vibratoire. Elles peuvent donc être considérées avec un bon degré d'approximation comme à l'équilibre.

2.4 Les équations constitutives

Deux autres équations sont nécessaires pour relier la pression et la température aux variables déduites des précédentes. La première est la loi d'état du mélange gazeux. En supposant que chaque espèce est un gaz parfait, on obtient la loi suivante pour le mélange :

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{k=\text{espèces}} \frac{Y_k}{m_k}$$

où Y_k représente la fraction massique de l'espèce k , m_k sa masse molaire et \mathcal{R} , la constante des gaz parfaits.

La température, qui ne fait pas partie explicitement des variables du système, est calculée à partir de l'énergie totale du système. L'énergie interne d'un atome se répartit entre son énergie translationnelle et son énergie électronique qui est négligée dans cette étude. Pour une molécule, il faut y ajouter une énergie de rotation et une énergie de vibration. On considère les modes de translation et de rotation, qui ont besoin de peu de collisions pour s'équilibrer,

comme à l'équilibre. Pour le mélange gazeux chimiquement réactif qui nous intéresse, on peut écrire que l'énergie totale par unité de volume s'exprime de la façon suivante :

$$E = E_c + H_0 + E_{C_v} + E_v$$

où :

$E = \rho e$, où e est l'énergie totale par unité de masse,

$E_c = \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2)$ est l'énergie cinétique,

$H_0 = \sum_{k=1}^3 \rho_k h_k^0$ est l'énergie de formation des espèces produites,

h_k^0 pour $k = 1, 2, 3$ est l'enthalpie de formation respectivement de O , N et NO ,

$E_{C_v} = \sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v,k} T$ est l'énergie interne de translation-rotation,

$C_{v,k}$ est la capacité calorifique massique à volume constant de l'espèce k : $3/2\mathcal{R}_k$ si k est monoatomique, $5/2\mathcal{R}_k$ si k est diatomique,

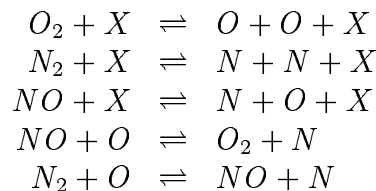
$\mathcal{R}_k = \mathcal{R}/m_k$,

$E_v = \sum_{k=3}^5 E_{v,k}$, où $E_{v,k}$ est l'énergie de vibration totale par unité de volume de l'espèce k , dont l'expression est donnée dans les sections suivantes.

3 Modélisation des termes sources

3.1 Termes sources de la chimie

On a choisi un schéma cinétique à $R_c = 17$ réactions développé par Zel'dovich [27] :



où X est un agent de collision qui peut-être l'une quelconque des 5 espèces du mélange. Les 3×5 premières équations sont des réactions de dissociation, les 2 dernières des réactions d'échange.

Pour la modélisation des termes sources, on a choisi le modèle de Park détaillé dans [16].

3.2 Termes sources de la vibration

Pour modéliser les termes sources de la vibration, il faut considérer tous les échanges possibles entre les différents modes de stockage de l'énergie interne. Lorsque deux molécules entrent en collision, l'une gagne (ou perd) de l'énergie de vibration que l'autre cède (ou prend) sous forme d'énergie de transrotation ou d'énergie de vibration. On est donc amené à considérer les échanges vibration-transrotation, les échanges vibration-vibration. Pour modéliser les phénomènes de vibration, on suppose que les espèces diatomiques répondent à l'hypothèse de l'oscillateur harmonique à nombre fini de niveaux d'énergie.

3.2.1 Modèle de l'oscillateur harmonique à nombre fini de niveaux d'énergie

Dans ce modèle la molécule de l'espèce diatomique k est assimilée à un oscillateur harmonique dont les niveaux d'énergie de vibration sont uniformément répartis et donnés par :

$$\epsilon_{v,k} = n_v k_b \theta_{v,k} \quad n_v = 0, 1, 2, \dots, N_{v,k}$$

où k_b est la constante de Boltzmann et $\theta_{v,k}$ est la température de vibration caractéristique de l'espèce k , dont on a choisi les valeurs données dans [8]. Le nombre $N_{v,k}$ de niveaux permis d'énergie vibrationnelle est alors lié à l'énergie de dissociation $k_b \theta_{d,k}$ par la relation :

$$N_{v,k} = 1 + E \left[\frac{\theta_{d,k}}{\theta_{v,k}} \right]$$

où $E[.]$ désigne la partie entière, $\theta_{d,k}$ est la température de dissociation caractéristique de l'espèce k (dans de nombreux ouvrages, ce nombre est considéré comme infini, ce qui revient à dire que la molécule vibre sans jamais se dissocier). Avec ces hypothèses, l'énergie de vibration par unité de masse de l'espèce k est donnée en fonction de la température de vibration $T_{v,k}$ par :

$$e_{v,k} = \frac{\mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{e^{\frac{\theta_{v,k}}{T_{v,k}}} - 1} - \frac{N_{v,k} \mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{e^{\frac{N_{v,k} \theta_{v,k}}{T_{v,k}}} - 1} \quad (3)$$

3.2.2 Echanges Vibration-Translation

Nous reprenons la forme classique de Landau-Teller[12] :

$$\Omega_{v,k}^{VT} = \Omega_{v,k}^{VT'} + \Omega_{v,k}^{VT''} \quad (4)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Omega_{v,k}^{VT'} &= \frac{E_{v,k}^{eq} - E_{v,k}}{\tau_k^{VT}} \\ \Omega_{v,k}^{VT''} &= \frac{\Omega_{c,k}}{\rho_k} E_{v,k} \end{aligned} \quad (5)$$

où :

$E_{v,k} = \rho_k e_{v,k}$ est l'énergie volumique de vibration.

$E_{v,k}^{eq}$ est l'énergie volumique de vibration calculée à l'équilibre en égalant $T_{v,k}$ à T_{tr} dans (3).

τ_k^{VT} est le temps caractéristique de relaxation vibrationnelle dont on utilisera les deux expressions proposées respectivement par Milikan et White d'une part dans [15] et par Blackmann d'autre part dans [1], [17]. On remarque que plus les temps de relaxation sont petits, plus le retour vers l'équilibre est rapide.

$\Omega_{v,k}^{VT'}$ est le terme classique de Landau-Teller. $\Omega_{v,k}^{VT''}$ est un terme dû au fait qu'on écrit les équations de bilan en fonction de l'énergie de vibration par unité de volume.

3.2.3 Echanges Vibration-Vibration

On utilise ici l'expression du terme source dû aux échanges vibration-vibration formulée par Stupochenko [20], citée par Marie-Claude Druguet dans [8]. Dans ces échanges, il faut bien entendu tenir compte de NO , espèce à l'équilibre vibrationnel :

$$\Omega_{v,k}^{VV} = \frac{1}{\tau_{kk'}^{VV}} \left(\frac{1}{\rho R \theta_{v,k}} \left(E_{v,k'} (E_{v,k} + \rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k'}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T_{tr}}} - E_{v,k} \left(E_{v,k'} + \left(\frac{\rho_{k'}}{m_{k'}} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}} \right) \mathcal{R} \theta_{v,k} \right) \right) \right)$$

$$\Omega_{v,k'}^{VV} = \frac{1}{\tau_{kk'}^{VV}} \left(\frac{1}{\rho R \theta_{v,k}} \left(E_{v,k} \left(E_{v,k'} + \left(\frac{\rho_{k'}}{m_{k'}} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}} \right) \mathcal{R} \theta_{v,k} \right) - E_{v,k'} (E_{v,k} + \rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k'}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T_{tr}}} \right) \right)$$

où $\tau_{kk'}^{VV}$ est un temps de relaxation pour les échanges vibration-vibration, dont l'expression est détaillée dans la thèse de Maria Vittoria Salvetti [17]. Le terme source dans les équations de relaxation vibratoire est donc la somme des taux de production dus respectivement aux échanges V-T et V-V :

$$\boxed{\Omega_{v,k} = \Omega_{v,k}^{VT} + \Omega_{v,k}^{VV}}$$

4 Le couplage chimie-vibration.

Les phénomènes chimiques et vibratoires étudiés dans le chapitre précédents s'influencent mutuellement. Les effets de la vibration sur la chimie et de la chimie sur la vibration, sont désignés par Treanor et Marrone [21] et dans toute la suite de cette étude respectivement par modèle CVD (pour *Coupling Vibration-Dissociation*) et CVDV (*Coupling Vibration-Dissociation-Vibration*)

4.1 Influence de la vibration sur la dissociation : couplage CVD

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 translation, toutes les réactions

chimiques qui entraînent sa dissociation sont alors favorisées. Au contraire si la température de vibration, $T_{v,k}$, est plus petite que la température de translation-rotation, T_{tr} , la dissociation est ralentie. Treanor et Marrone proposent de tenir compte de ce phénomène en considérant que les constantes de réactions de dissociation sont multipliées par un facteur fonction de la température de translation, de la température de vibration et d'une température fictive liée à la température caractéristique de dissociation de la molécule. En effet, une molécule est d'autant plus réactive que son énergie de vibration est proche de l'énergie nécessaire à sa dissociation, autrement dit que sa température de vibration est proche de sa température caractéristique de dissociation. Ce modèle qui tient compte de la température de dissociation est dit modèle CVD préférentiel.

Les nouvelles constantes deviennent alors :

$$K_{d,r}^{dis'}(T_{tr}, T_{v,k}) = K_{d,r}^{dis}(T) \times V_D(T_{tr}, T_{v,k})$$

où $K_{d,r}^{dis'}$ est la nouvelle constante directe liée à la réaction de dissociation r et :

$$V_D(T_{tr}, T_{v,k}) = \frac{Q(T_{tr})Q(T_k^*)}{Q(T_{v,k})Q(-T_{p,k})}$$

est le coefficient de couplage pour les réactions de dissociation. T_k^* est définie par :

$$\frac{1}{T_k^*} = \frac{1}{T_{v,k}} - \frac{1}{T_{tr}} - \frac{1}{T_{p,k}}$$

où :

$$Q(T_{tr}) = \frac{1 - \exp\left(\frac{-N_{v,k}\theta_{v,k}}{T_{tr}}\right)}{1 - \exp\left(\frac{-\theta_{v,k}}{T_{tr}}\right)}$$

est la fonction de répartition moléculaire.

La température $T_{p,k}$ est un indice du degré de non-préférenciabilité du modèle. Elle varie fortement en fonction des caractéristiques de l'écoulement. Pour des écoulements hypersoniques externes sa valeur est encore mal connue ([8]). Dans cette étude, on se limite donc à considérer le modèle dit non-préférentiel, dans lequel $T_{p,k} \rightarrow \infty$.

Les réactions d'échange sont aussi affectées par le couplage en multipliant K_i , la constante inverse, pour la première et K_d , la constante directe, pour la seconde par le coefficient dont l'expression est donnée dans [8] et défini par :

$$V_E(T_{tr}, T_{v,k}) = \frac{\left(1 - \exp\left(-\frac{\theta_{v,k}}{T_{v,k}}\right)\right) - \exp\left(-\frac{E_{a,r} + \theta_{v,k}}{T_k^*}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{\theta_{v,k}}{T_{tr}}\right)\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{\theta_{v,k}}{T_k^*}\right)\right) \left[\left(1 - \exp\left(-\frac{\theta_{v,k}}{T_{tr}}\right)\right) N_{v,k} + 1\right]}$$

où $E_{a,r}$ représente l'énergie d'activation de la réaction r .

4.2 Influence de la chimie sur la vibration : couplage CVDV

Les molécules diatomiques qui disparaissent ou apparaissent à la suite des réactions chimiques décrites plus haut n'ont pas la même énergie moyenne de vibration que celle qui règne dans le fluide à l'instant considéré. En particulier, l'énergie moyenne des molécules qui se dissocient est supérieure à l'énergie moyenne de l'écoulement. On voit donc que la dissociation chimique a un impact sur la dépopulation des niveaux d'énergie vibratoire. C'est le couplage CVDV dont une description détaillée est donnée dans [8].

Soit $\overline{E_{v,k}^p}$ l'énergie vibrationnelle moyenne perdue à chaque dissociation et $\overline{E_{v,k}^g}$ l'énergie vibrationnelle moyenne gagnée à chaque recombinaison pour l'espèce k . Alors le taux de variation moyen d'énergie vibrationnelle perdue aux cours des dissociations est donné par :

$$\Omega_k^{CVDV,p} = -\frac{\overline{E_{v,k}^p}}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_p$$

et par ailleurs le taux de variation dû aux processus de recombinaison est donné par :

$$\Omega_{v,k}^{CVDV,g} = \frac{\overline{E_{v,k}^g}}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_g$$

où $\frac{1}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_p$ est le taux moyen de dissociation et $\frac{1}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_g$ est le taux moyen de recombinaison. Par ailleurs, un troisième terme tient compte de la variation d'énergie vibrationnelle due à la variation du nombre des molécules, qui est donnée par :

$$\begin{aligned} \Omega_{v,k}^{CVDV,3} &= \frac{E_{v,k}}{\rho_k} \left(\left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_g - \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_p \right) \\ &= -\frac{E_{v,k}}{\rho_k} \Omega_{c,k} \end{aligned}$$

en effet $\frac{1}{\rho_k} \left(\left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_g - \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_p \right)$ représente le taux moyen de variation de la fraction massique de l'espèce k . Le couplage CVDV se caractérise donc par un terme source supplémentaire dans les équations de relaxation vibrationnelle $\Omega_{v,k}^{CVDV}$:

$$\boxed{\Omega_{v,k}^{CVDV} = \Omega_{v,k}^{CVDV,p} + \Omega_{v,k}^{CVDV,g} + \Omega_{v,k}^{CVDV,3}}$$

On constate que le terme $\Omega_{v,k}^{CVDV,3}$ s'annule avec le terme $\Omega_{v,k}^{VT''}$ de l'équation 5.

On montre ([8], [23]) que :

$$\overline{E_{v,k}^p} = \frac{\rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{\exp\left(\frac{\theta_{v,k}}{T_k^*}\right) - 1} - \frac{N_{v,k} \rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{\exp\left(\frac{N_{v,k} \theta_{v,k}}{T_k^*}\right) - 1} \quad (6)$$

et que :

$$\overline{E_{v,k}^g} = \frac{\rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{\exp\left(\frac{\theta_{v,k}}{T_{p,k}}\right) - 1} - \frac{N_{v,k} \rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k}}{\exp\left(\frac{N_{v,k} \theta_{v,k}}{T_{p,k}}\right) - 1} \quad (7)$$

Pour un oscillateur harmonique répondant au modèle non préférentiel :

$$\overline{E_{v,k}^g} \rightarrow \frac{1}{2} \rho_k \mathcal{R}_k \theta_{v,k} (N_{v,k} - 1)$$

5 Nouvelle formulation des équations de vibration

Afin de conduire une expérimentation numérique, on considère un écoulement en déséquilibre thermochimique autour d'un obstacle de forme demicylindrique de rayon 1m. Les conditions à l'infini amont sont :

- $Z = 75km$ (altitude)
- $T_\infty = 205K$
- $\rho_\infty = 4.6 \times 10^{-5} Kg/m^3$

La méthode numérique employée repose sur une formulation de type Volumes Finis, décentrée par décomposition de flux. L'approche M.U.S.C.L de van Leer permet d'obtenir une précision à l'ordre 2 en espace [24]. La méthode est appliquée à des maillages non structurés de type éléments finis développée par Dervieux [5].

5.1 Résultats préliminaires

On précise que dans tous les calculs effectués le critère d'arrêt du processus itératif en temps est basé sur la norme L_2 du résidu normalisé à la valeur initiale, définit par :

$$L_2(Res) = \sqrt{\sum_i \left(\frac{|flux_i(\rho^n)|}{aire(C_i)} \right)^2}$$

où C_i est l'aire de la cellule volume fini et $flux_i(\rho^n)$ est le flux numérique pour l'équation de la masse évalué au noeud i , à l'itération n . Dans toute la suite, pour les calculs effectués avec le schéma implicite, le nombre de "CFL" (Courant-Friedrich-Levy) à partir duquel on calcule le pas de temps local évolue au cours de la convergence selon la loi suivante :

$$CFL = \min\left(\frac{CFL_0}{residu}, CFL_{max}\right)$$

On compare dans le tableau suivant les résultats obtenus à Mach 15. Les test sont effectués sur un Sparc10 avec les paramètres suivants pour la loi de CFL :

MACH	CFL ₀	CFL _{max}
15	1	100

Pour le maillage 630 points, on donne dans le tableau 1 le nombre d'itérations nécessaires pour une convergence à 10^{-4} du schéma [13]:

Modèle	Itérations	t_{cpu}
Vibration à l'éq.	71	3mn12s
Hors éq. sans couplage	74	3mn15s
Hors éq. + couplage CVD	139	5mn52s

TAB. 1 - Convergence pour différents modèles à Mach 15

On constate que le couplage CVD constitue un accroissement notable de la difficulté du problème. Or ces problèmes s'accroissent pour les Mach plus élevés. A Mach 25, le nombre d'itérations et les temps de calcul nécessaires à la convergence augmentent beaucoup si on utilise les temps de relaxation proposés par Blackmann tandis que l'algorithme itératif ne converge plus dans le cas où on utilise les temps de relaxation proposés par Milikan et White comme le montre le tableau 2 et la figure 1.

	Millikan-White				Blackman			
	CFL_0	KT	t_{cpu}	CFL_{max}	CFL_0	KT	t_{cpu}	CFL_{max}
sans couplage	1.5	92	272s	∞	1.5	84	244s	∞
couplage CVD	non	non	non	non	1.5	180	560s	50

TAB. 2 - Convergence pour différents modèles à Mach 25

Une des raisons de la grande raideur du problème lorsque le nombre de Mach est élevé vient du choix des énergies de vibration par unité de volume comme variables dans les équations de relaxation vibratoire. En effet, dans ce type d'écoulement, l'oxygène diatomique se dissocie presque entièrement derrière le choc et E_{v,O_2} et ρ_{O_2} tendent vers 0. De sorte que lorsqu'on calcule numériquement l'énergie de vibration par unité de masse (pour le calcul de la température de vibration par exemple), on manipule deux quantités très petites, ce qui entraîne de grosses erreurs numériques et la fragilisation du code. Par ailleurs et pour les mêmes raisons, on commet une erreur importante dans le calcul du terme $\Omega_{c,k}/\rho_k$ dans les équations de relaxation vibratoire, ce qui contribue encore à la raideur du code.

5.2 Nouvelle Formulation

On a remarqué précédemment qu'une difficulté numérique dans la formulation précédente provient du choix des énergies de vibration par unité de volume comme variables de travail, ce qui introduit des erreurs numériques importantes lorsque la fraction massique de l'espèce

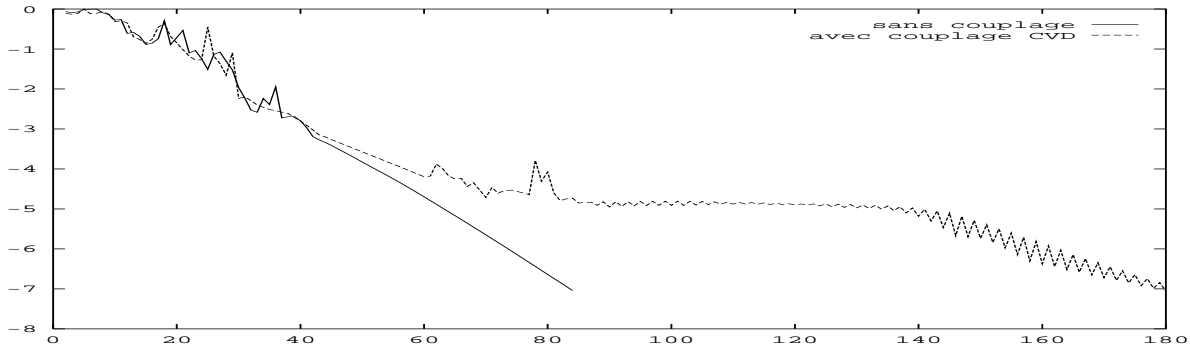


FIG. 1 - Courbes de convergences comparées, avec et sans CVD, Blackman, Mach 25

diatomique considérée est elle-même faible (O_2). Dans le cas qui nous intéresse, les fractions d'espèces interviennent au dénominateur d'une part lors du calcul de la température de vibration, d'autre part dans les termes sources de la vibration. Si on remplace dans les équations de vibration comme nous l'a suggéré le Professeur Pandolfi, lors d'une communication privée, les énergies volumiques $\rho_{O_2} e_{v,O_2}$ et $\rho_{N_2} e_{v,N_2}$ par deux nouvelles grandeurs $\rho e_{v,O_2}$ et $\rho e_{v,N_2}$, on manipule des quantités sur lesquelles on fera moins d'erreur puisque ρ reste fini. On montre en annexe A que ce changement de variable conserve les solutions faibles du problème et peut donc être adopté pour la formulation Volumes-finis utilisée ici.

5.2.1 Les nouvelles équations

Avec les nouvelles variables, un calcul détaillé dans l'annexe B donne la nouvelle forme des équations de relaxation vibrationnelle :

$$\boxed{\frac{d\mathcal{E}_{v,k}}{dt} = (\mathcal{E}_{v,k})_t + \text{div}(\mathcal{E}_{v,k} \vec{V}) = \Omega_{v,k}^{VT,nouv} + \Omega_{v,k}^{VV,nouv} + \Omega_{v,k}^{CVDV,nouv}}$$

$$\text{avec : } \Omega_{v,k}^{VT,nouv} = \frac{\mathcal{E}_{v,k}^0 - \mathcal{E}_{v,k}}{\tau_{VT_k}} \quad k=O_2, N_2$$

$$\Omega_{v,k}^{VV,nouv} = \frac{\rho'_k}{\tau_{VV}^{kk'} \rho^2 R \theta_{v,k}} (\mathcal{E}_{v,k'} (\mathcal{E}_{v,k} + \rho \mathcal{R}_k \theta_{v,k'}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T} \tau_r} - \mathcal{E}_{v,k} (\mathcal{E}_{v,k'} + \frac{\rho}{\rho'_k} (\frac{\rho'_k}{m'_k} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}}) \mathcal{R} \theta_{v,k}))$$

$$\Omega_{v,k'}^{VV,nouv} = \frac{\rho_k}{\tau_{VV}^{kk} \rho^2 R \theta_{v,k}} (\mathcal{E}_{v,k} (\mathcal{E}_{v,k'} + \frac{\rho}{\rho'_k} (\frac{\rho'_k}{m'_k} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}}) \mathcal{R} \theta_{v,k'}) - \mathcal{E}_{v,k'} (\mathcal{E}_{v,k} + \rho \mathcal{R}_k \theta_{v,k}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T} \tau_r})$$

$$\Omega_{v,k}^{CVDV,nouv} = \frac{\overline{\mathcal{E}_{v,k}^g}}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_g - \frac{\overline{\mathcal{E}_{v,k}^p}}{\rho_k} \left(\frac{d\rho_k}{dt} \right)_p - \frac{\mathcal{E}_{v,k}}{\rho_k} \Omega_{c,k}$$

Remarque le terme source dû au couplage CVDV : ce terme fait réapparaître $-\frac{\mathcal{E}_{v,k}}{\rho_k}\Omega_{c,k}$. Dans ces conditions, le changement de variable n'est plus justifié et pour tous les calculs concernant ce modèle on est resté en ancienne formulation comme on le verra par la suite.

Remarque sur l'implémentation de cette méthode : aucun changement dans le calcul des flux n'est nécessaire. En effet, le calcul du flux de l'énergie de vibration s'effectue grâce à la première composante du flux de Van Leer \mathcal{F}_1 ([9]). Dans ces conditions :

$$\mathcal{F}_1^+(\rho e_{v,k}) = e_{v,k}\mathcal{F}_1^+(\rho)$$

donc

$$\Phi_{V_{k,k'}} = \frac{\mathcal{E}_{V_k}}{\rho_k}\mathcal{F}_1^+(\rho_k) + \frac{\mathcal{E}_{V_{k'}}}{\rho_{k'}}\mathcal{F}_1^-(\rho_{k'})$$

Cependant, il faut reformuler les calculs de la température et de son gradient ainsi que ceux des jacobiens des termes sources en fonction des nouvelles variables. On trouvera ces calculs en annexes C à E. Les calculs de jacobiens étant une tâche lourde à gérer à la main, on a développé une routine utilisant le logiciel *Maple*¹.

5.2.2 Comparaison entre l'ancienne et la nouvelle formulation

On a utilisé deux maillages présentés aux figures 2 et 3. Le maillage grossier est constitué de 630 points. On l'utilise pour valider la méthode. Le maillage fin est pratiquement deux fois plus dense dans chaque direction et comporte 2555 points; il sert de support à l'étude des phénomènes physiques. On a systématiquement fait converger le schéma de telle sorte que la norme L_2 du résidu des équations eulériennes soit inférieure à 10^{-4} , sauf cas précisés.

On compare les résultats obtenus avec les nouvelles variables et ceux obtenus avec l'ancienne formulation. On effectue les tests dans les conditions les plus difficiles, c'est à dire à Mach 25 avec couplage CVD en utilisant les temps de relaxation de Blackman.

On constate un changement dans la valeur des pics de température de vibration (figure 5) par rapport à l'ancienne méthode ce qui conforte l'intuition d'une meilleure estimation de l'énergie de vibration massique $e_{v,k}$ par cette méthode.

Ici, beaucoup moins de problèmes dûs à la raideur, le code est très souple, comme on peut le constater dans le tableau suivant et sur la figure 4 :

	Millikan-White				Blackman			
	CFL_0	KT	t_{cpu}	CFL_{max}	CFL_0	KT	t_{cpu}	CFL_{max}
sans couplage	1.5	86	327s	∞	1.5	85	309s	∞
couplage CVD	1.5	89	363s	∞	1.5	89	345s	∞

1. *Maple* est une marque déposée de *Waterloo Maple Software*.

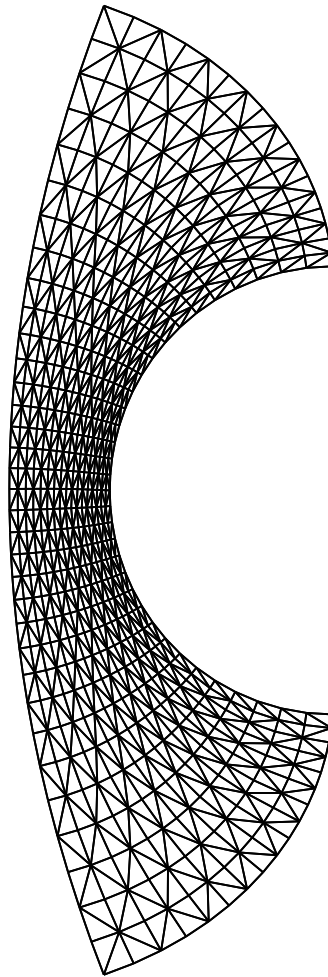


FIG. 2 - *Maillage demicylindrique de 630 points*

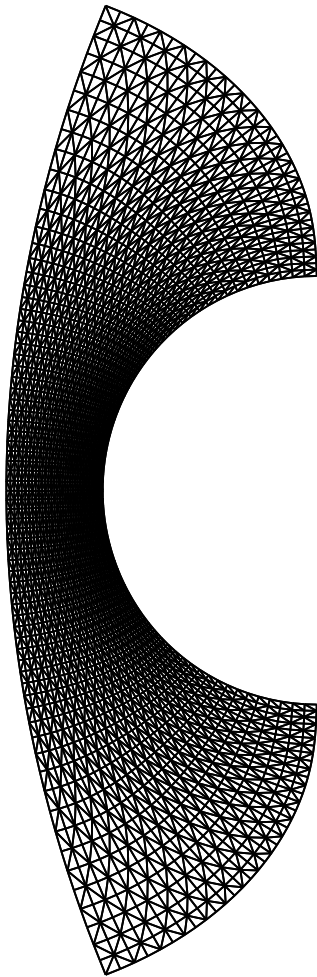


FIG. 3 - *Maillage demicylindrique de 2555 points*

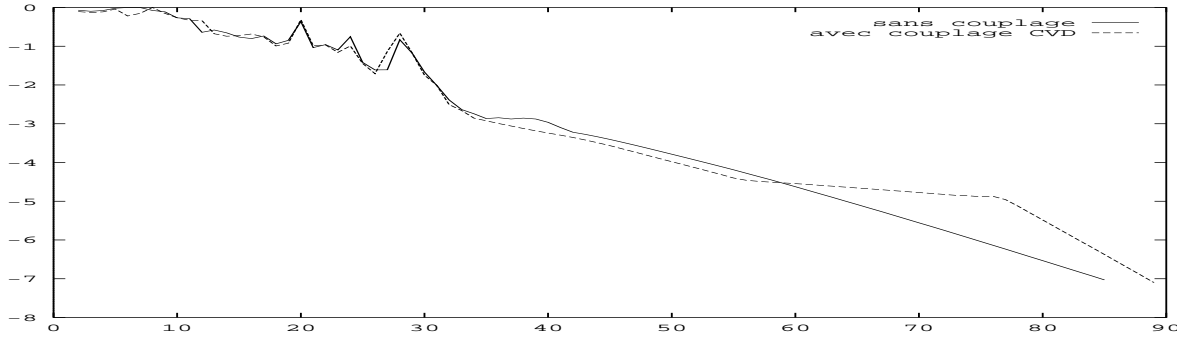


FIG. 4 - Courbes de convergences comparées, avec et sans CVD, Blackman, $M_\infty = 25$, nouvelle formulation

Quand on couple les équations, l'état stationnaire est atteint en moins d'itérations qu'avec l'ancienne formulation et il en résulte un gain substantiel en temps de calcul.

6 Influence de la modélisation du déséquilibre vibratoire

On s'intéresse ici à l'effet de la modélisation du déséquilibre vibratoire ainsi que du couplage entre celui-ci et les phénomènes chimiques.

On compare les résultats obtenus avec les quatre modèles suivants:

- a) l'écoulement est supposé à l'équilibre vibratoire (\diamond),
- b) le déséquilibre vibratoire est pris en compte, mais le couplage entre les phénomènes vibratoires et chimiques n'est pas considéré (+),
- c) l'effet de la vibration sur la cinétique chimique est pris en compte (modèle CVD) (\square),
- d) l'effet des phénomènes chimiques sur le déséquilibre vibratoire est aussi considéré (modèle CVDV) (\times).

6.1 Ecoulement à Mach 15

On présente ici les résultats numériques pour l'écoulement autour d'un demi-cylindre à un Mach à l'infini en amont de 15 et pour les conditions illustrées à la section 5. On utilise le maillage à 2555 points. Les résultats sont précis à l'ordre 2 en espace.

Dans les trois premières figures, on présente les isovaleurs respectivement du nombre de Mach, de la température et de la densité où l'on compare le modèle vibration à l'équilibre (dans la partie haute) au modèle CVDV (dans la partie basse). On note sur ces trois figures, l'épaississement de la couche de choc pour le modèle en déséquilibre vibratoire. On note aussi que la température est plus sensible à la modélisation des termes de vibration que les deux autres variables présentées.

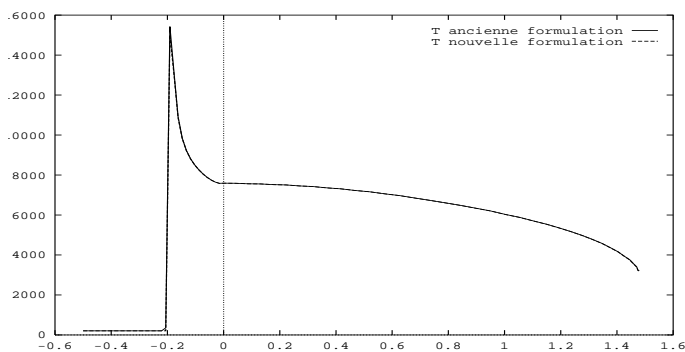


FIG. 5 - Température de translation, CVD, Blackman, $M_\infty = 25$, demicylindre 2555 pts ; ancienne et nouvelle formulations

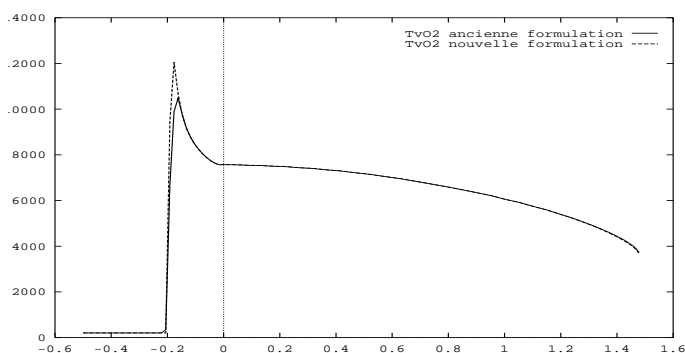


FIG. 6 - Température T_{VO_2} , CVD, Blackman, $M_\infty = 25$, demicylindre 2555 pts ; ancienne et nouvelle formulations

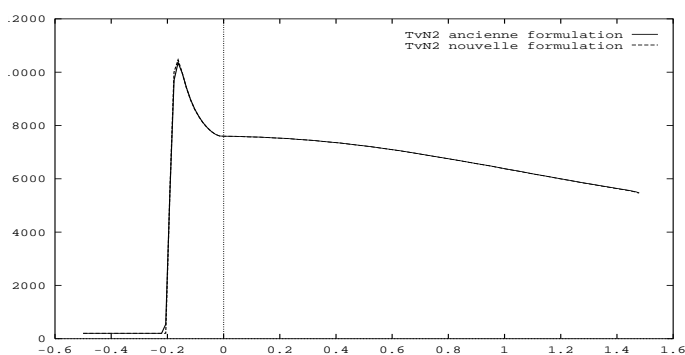


FIG. 7 - Température T_{VN_2} , CVD, Blackman, $M_\infty = 25$, demicylindre 2555 pts ; ancienne et nouvelle formulations

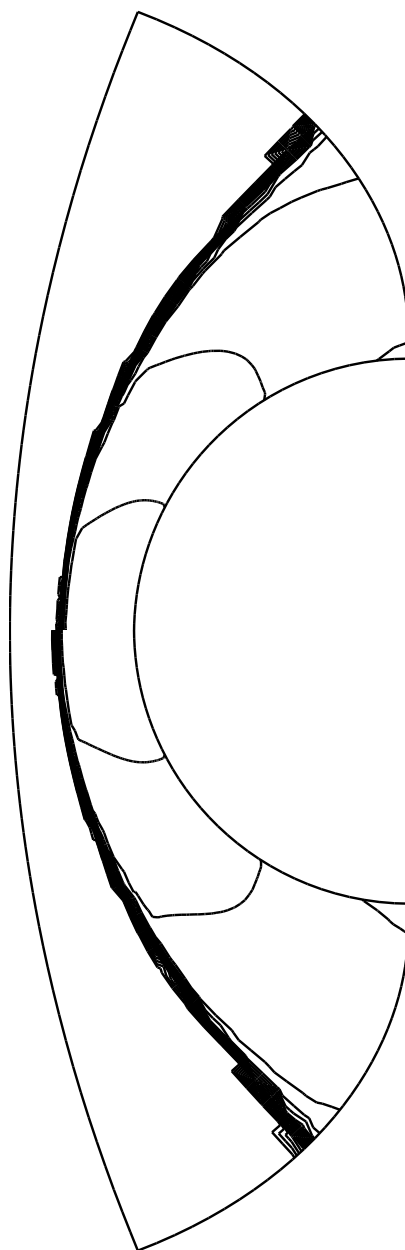


FIG. 8 - Isolignes du nombre de Mach pour le modèle vibration à l'équilibre (moitié supérieure) et pour le modèle CVDV (moitié inférieure)

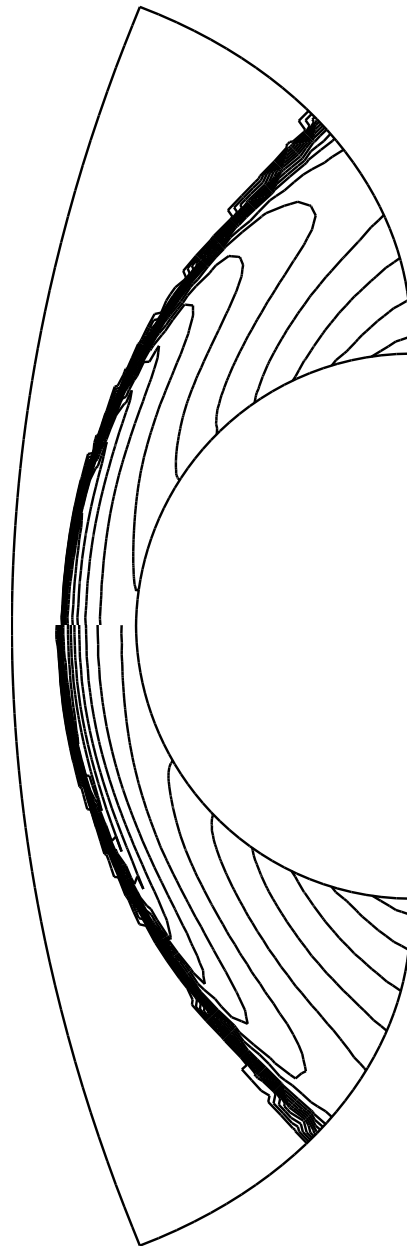


FIG. 9 - Isolignes de la température pour le modèle vibration à l'équilibre (moitié supérieure) et pour le modèle CVDV (moitié inférieure)

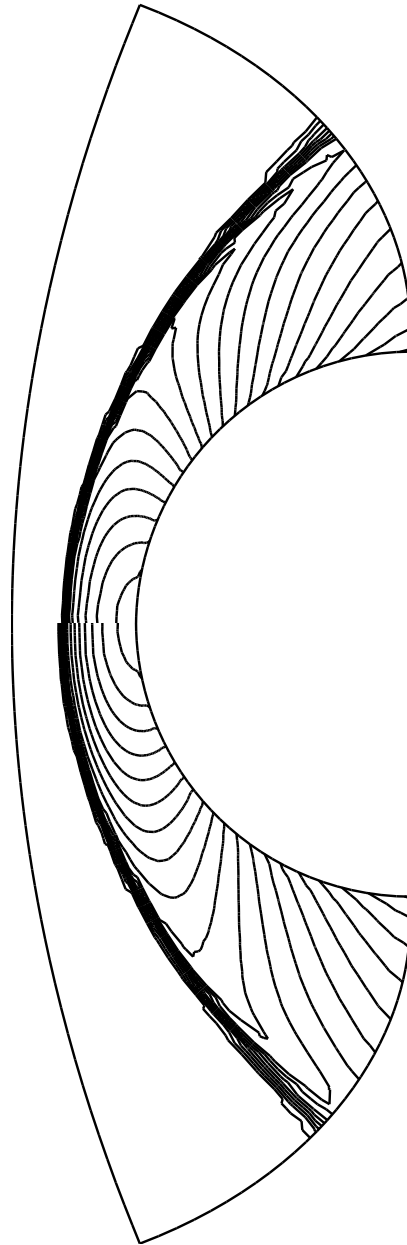


FIG. 10 - *Isolignes de la densité pour le modèle vibration à l'équilibre (moitié supérieure) et pour le modèle CVDV (moitié inférieure)*

Dans les figures qui suivent, on trace la courbe des valeurs des variables sur la ligne de courant du point d'arrêt. Sur la figure 11 on compare les valeurs du nombre de Mach sur la ligne de courant du point d'arrêt obtenues avec les quatres modèles présentés précédemment.

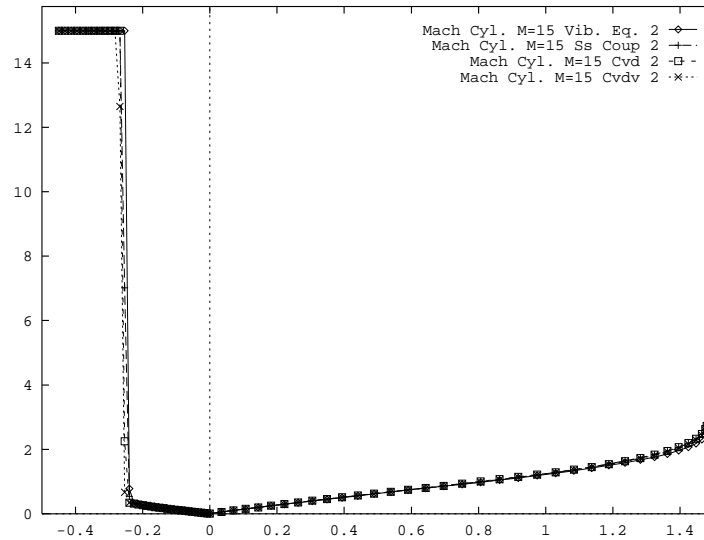


FIG. 11 - *Mach pour les différents modèles à $M_\infty = 15$*

On remarque que lorsque le déséquilibre vibratoire est pris en compte le choc tend à s'éloigner du corps et cette tendance est accentuée si les couplages sont considérés. L'épaississement de la couche de choc pour le modèle CVDV par rapport au modèle à l'équilibre est de l'ordre de 6%. Sur la figure 12, on présente les mêmes coupes pour la température de transrotation obtenue avec les différents modèles.

On remarque que la température dans le choc augmente sensiblement pour les modèles prenant en compte le déséquilibre vibratoire par rapport au cas à l'équilibre. En effet dans le cas hors-équilibre à parité d'énergie interne après le choc, l'énergie associée aux modes de translation et rotation est plus élevée (celle associée à la vibration étant gelée dans le choc): il en résulte donc une plus grande valeur de T_{tr} . En conséquence la densité est plus basse et le choc a tendance à s'éloigner de la paroi. Les différences dans la couche de choc et sur le corps, en revanche, ne sont pas très sensibles.

On compare ensuite les coupes des températures vibratoires des espèces O_2 (figure 14) et N_2 (figure 13), obtenues avec les différents modèles (pour le modèle à l'équilibre la température reportée est bien évidemment la température de translation-rotation).

La température de vibration de O_2 pour le modèle qui ne considère pas le couplage présente un pic après le choc plus élevé que pour les modèles CVD et CVDV. En particulier la valeur de ce pic est sensiblement réduite pour le modèle CVDV. Les différences entre la

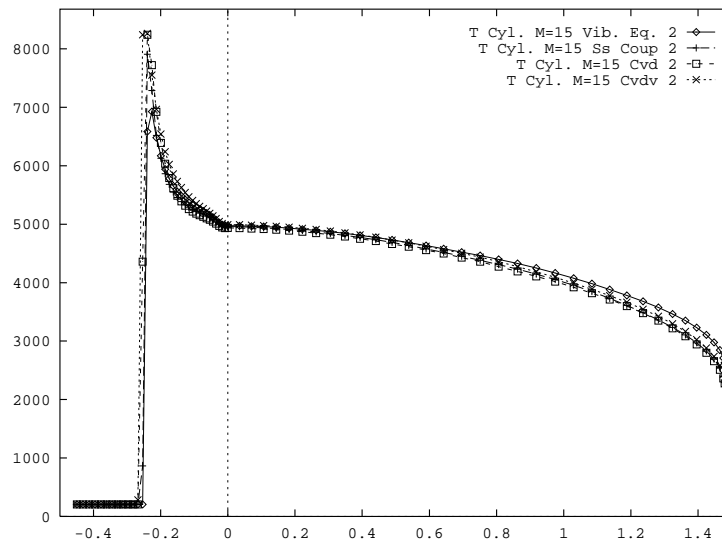


FIG. 12 - *Température pour les différents modèles à $M_\infty = 15$*

température de vibration de O_2 et T_{tr} deviennent faibles très rapidement après le choc pour tous les modèles, à l'exception du modèle CVDV, pour lequel la relaxation vibratoire est achevée près du point d'arrêt. Sur le corps, on ne remarque pas de différences notables parmi les modèles.

L'effet du déséquilibre vibratoire sur la température de vibration de N_2 est par contre plus marqué. En effet après le choc elle est sensiblement plus basse que T_{tr} et l'équilibre vibratoire est atteint seulement près du point d'arrêt. Sur le corps la température de vibration de N_2 fige à une valeur qui est sensiblement plus élevée que T_{tr} . En revanche, les différences entre les modèles prenant en compte le déséquilibre vibratoire ne sont pas très marquées.

Sur les figures 15 et 16, on présente les coupes sur la ligne de courant du point d'arrêt des fractions massiques de O et NO .

Si l'on considère le déséquilibre vibratoire, sans prendre en compte le couplage, la dissociation de l'oxygène diatomique est augmentée par rapport au cas à l'équilibre et cela est probablement dû à la valeur plus élevée de la température après le choc. Lorsqu'on considère le couplage CVD, la dissociation de O_2 est ralentie dans une première partie de la couche de choc, dans laquelle la température de vibration est inférieure à T_{tr} , tandis qu'elle est favorisée après quand T_{v,O_2} est supérieure à T_{tr} . L'introduction du couplage CVDV, en diminuant la température de vibration de O_2 a pour effet de ralentir la dissociation de O_2 par rapport au modèle CVD. Les différences parmi les modèles ne sont cependant pas très marquées.

En ce qui concerne la fraction massique de NO , l'introduction du couplage a un effet plus sensible et en particulier les valeurs obtenues avec le modèle CVDV sont notablement inférieures.

Dans le but d'étudier l'influence de la précision spatiale sur la solution numérique, on compare sur les figures 17 et 18 le nombre de Mach et la température de translation-rotation

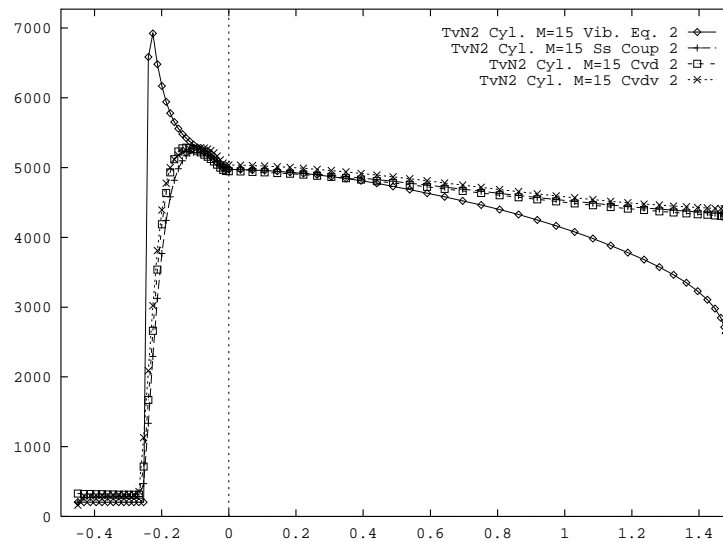


FIG. 13 - Température de vibration de N_2 pour les différents modèles à $M_\infty = 15$

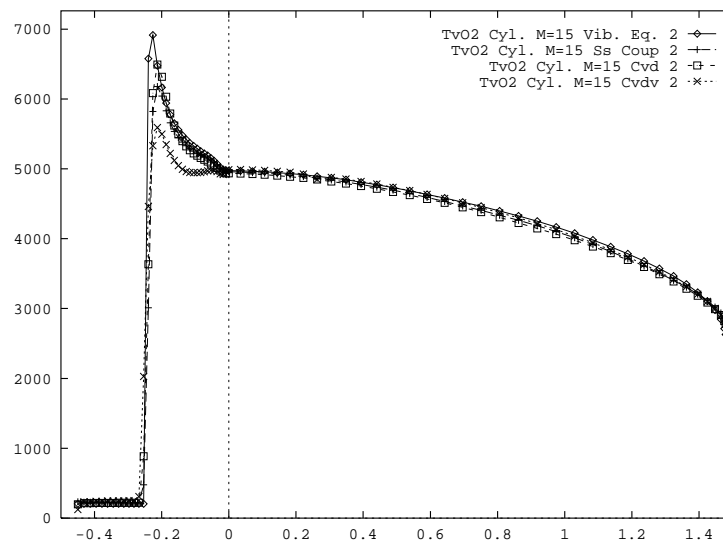


FIG. 14 - Température de vibration de O_2 pour les différents modèles à $M_\infty = 15$

obtenus avec le modèle CVD respectivement à l'ordre 1 (ligne continue) et à l'ordre 2 (ligne tiretée). On remarque que l'épaisseur de la couche de choc tend à diminuer lorsque l'ordre de précision augmente. En effet l'ordre 1 présente plus de viscosité numérique. De plus la température dans le choc à l'ordre 2 augmente, tandis qu'elle est sensiblement inférieure au point d'arrêt et sur le corps. La température de vibration de O_2 obtenue à l'ordre 2 également tend à diminuer vers le point d'arrêt et sur le corps par rapport à l'ordre 1 (figure 19).

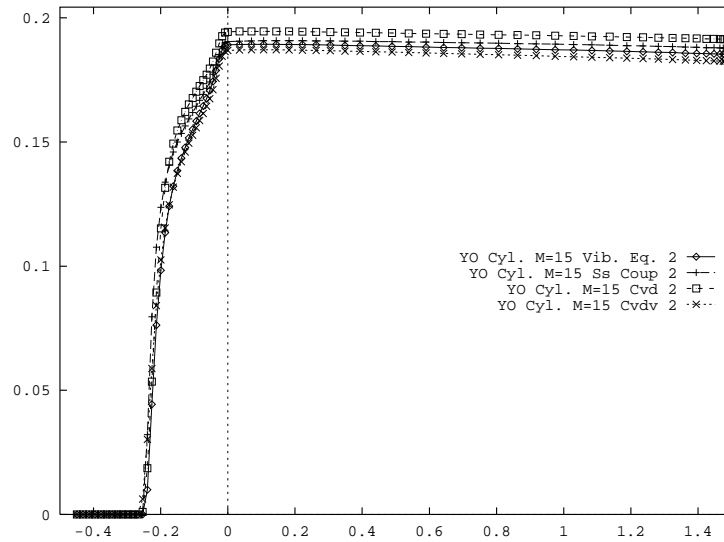


FIG. 15 - *Fraction massique de l'oxygène monoatomique pour les différents modèles à $M_\infty = 15$*

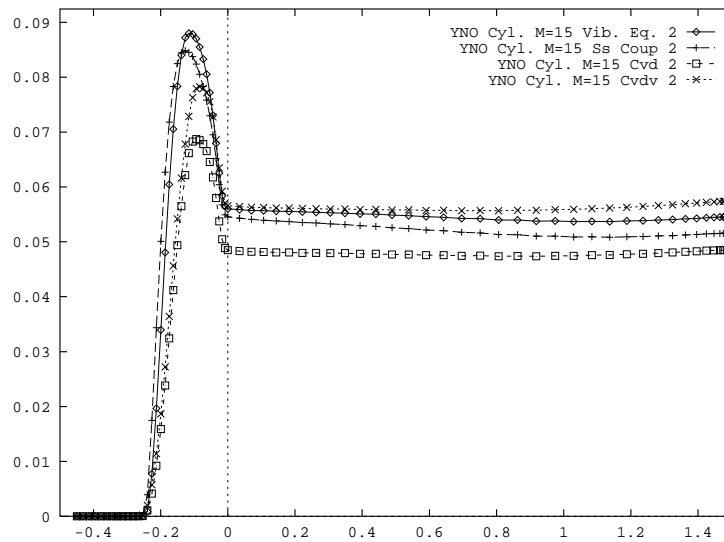


FIG. 16 - *Fraction massique de NO pour les différents modèles à M_∞*

6.2 Ecoulement à Mach 25

On s'intéresse maintenant à l'écoulement autour d'un cylindre dans les mêmes conditions que précédemment, mais en supposant que le nombre de Mach à l'infini amont est égal à 25. On compare ici les résultats obtenus avec les différents modèles sur le même maillage que dans 6.1, précis à l'ordre 1 en espace. En effet, à cause de la raideur plus élevée de ce cas

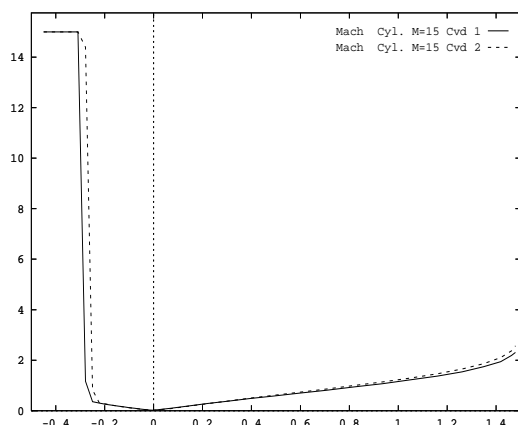


FIG. 17 - Nombre de Mach pour les modèles CVD ordre 1 et ordre 2

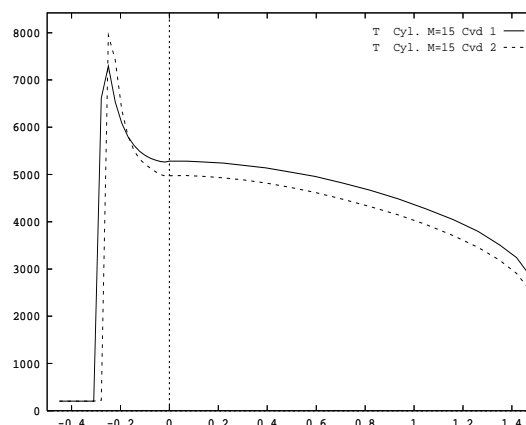


FIG. 18 - Température : modèles CVD ordre 1 et ordre 2.

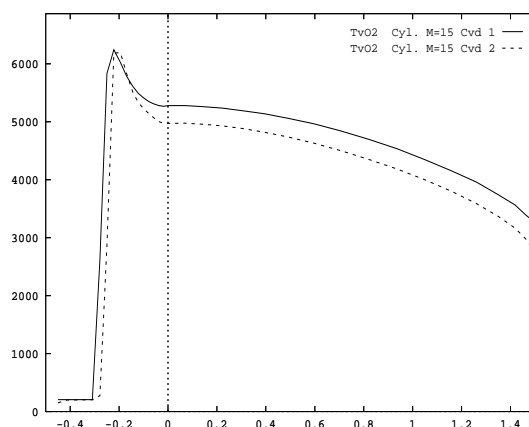


FIG. 19 - Température de vibration de l'oxygène diatomique : modèles CVD ordre 1 et ordre 2.

test, on n'a pas pu obtenir des résultats précis à l'ordre 2 pour le modèle CVD et CVDV.

On compare donc sur la figure 20 les coupes de nombre de Mach sur la ligne de courant du point d'arrêt. On ne remarque aucune différence notable entre les modèles. En effet l'équilibre vibratoire est atteint très rapidement après le choc, comme on peut voir des coupes des températures de vibration de O_2 et N_2 (figures 21 et 22).

Sur la figure 21, on constate que la température de vibration de O_2 est très mal approchée par le code. Il y a un mauvais conditionnement de l'algorithme numérique lorsque d'une part le couplage CVDV est pris en compte (on repasse en anciennes variables) et d'autre part le

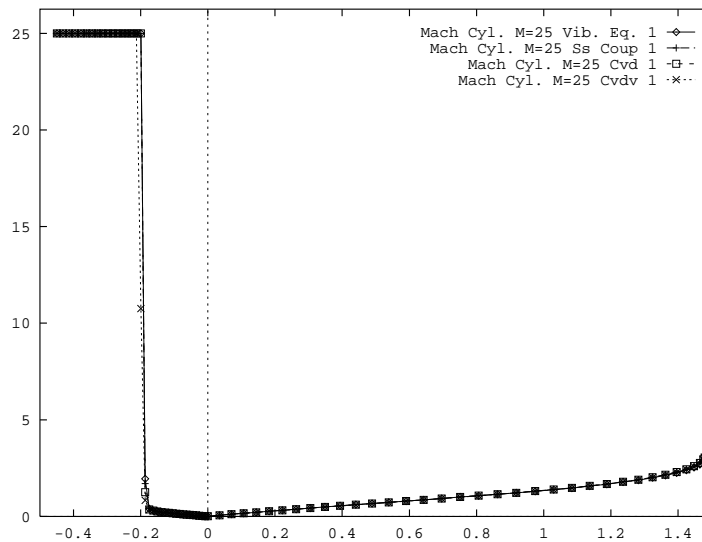


FIG. 20 - Nombre de Mach pour les différents modèles à $M_\infty = 25$

nombre de Mach est très élevé (ici $M_\infty = 25$). Il faut rappeler que la température de vibration ne fait pas partie des variables du système et qu'elle est calculée à partir de l'énergie volumique de vibration par une méthode de point fixe dans laquelle la densité de l'espèce correspondante intervient au dénominateur, ce qui entraîne des imprécisions incontrôlables si cette quantité tend vers zéro comme c'est le cas pour l'oxygène à de tels Mach. Cette imprécision numérique n'a cependant pas d'influence sur la convergence du code. De fait, on montre sur les figures 23, 24, 25, 26 d'une part les isovaleurs des énergies volumiques de vibration pour l'oxygène et pour l'azote qui sont les variables de travail et les coupes de ces mêmes valeurs sur l'axe de symétrie. On constate que l'énergie volumique de vibration de O_2 qui est la variable effectivement calculée est quasi-nulle partout sauf dans le choc où elle reste inférieure d'au moins un ordre de grandeur à l'énergie volumique de vibration de N_2 .

De plus l'oxygène diatomique se dissocie presque entièrement après le choc, comme l'on peut remarquer de la coupe de la fraction massique de O_2 sur la figure 27. Dans ce contexte, on s'attend donc à ce que la modélisation du déséquilibre vibratoire n'ait pas une influence très importante. Cette hypothèse est confirmée aussi par les coupes de T_{tr} présentées sur la figure 28: on ne remarque en effet aucune différence parmi les modèles, à l'exception d'une augmentation de température dans le choc pour le modèle CVD. De même, la cinétique chimique ne semble pas être influencée par la modélisation de la relaxation vibratoire, comme on peut le remarquer, par exemple, sur les coupes de la fraction massique de N (figure 29).

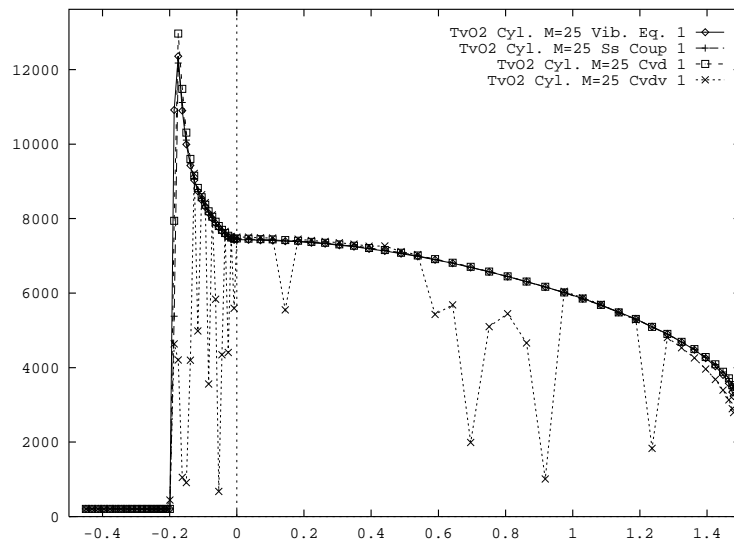


FIG. 21 - Température de vibration de O_2 pour les différents modèles à $M_\infty = 25$

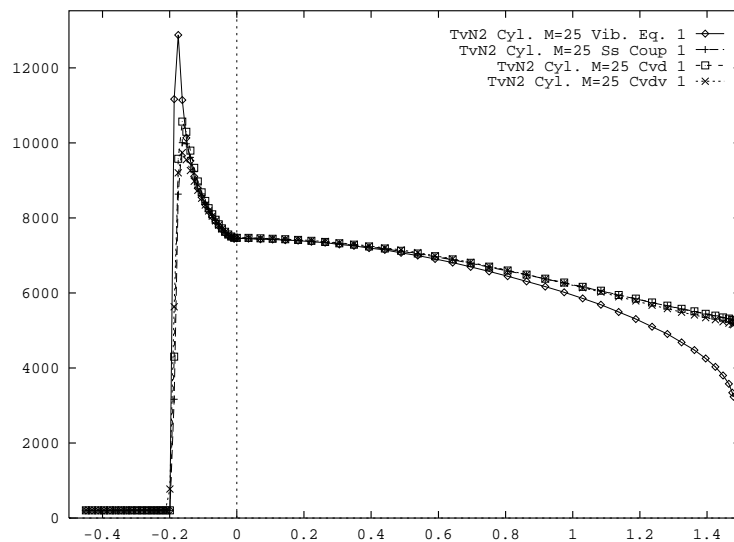


FIG. 22 - Température de vibration de N_2 pour les différents modèles à $M_\infty = 25$

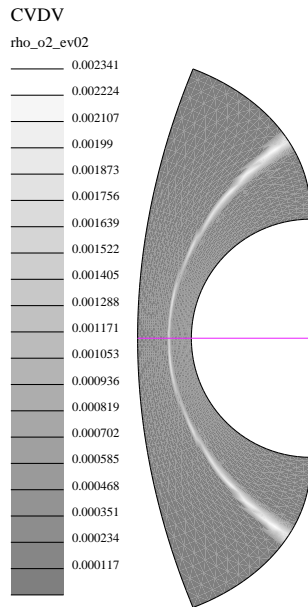


FIG. 23 - Isovaleurs de l'énergie de vibration volumique de O_2 (la droite indique la ligne de coupe)

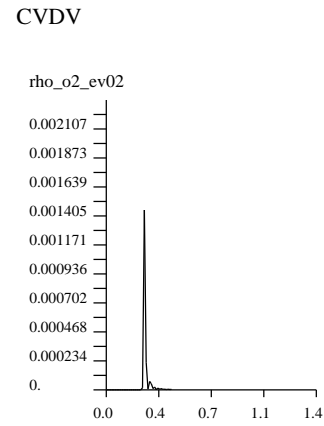


FIG. 24 - Coupe des valeurs de l'énergie de vibration volumique de O_2

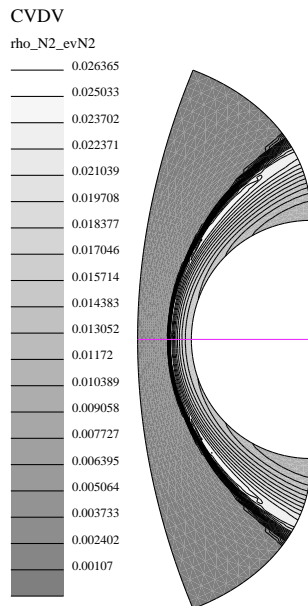


FIG. 25 - Isovaleurs et isolignes de l'énergie de vibration volumique de N_2

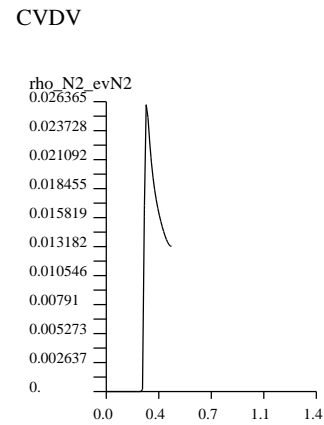


FIG. 26 - Coupe des valeurs de l'énergie de vibration volumique de N_2

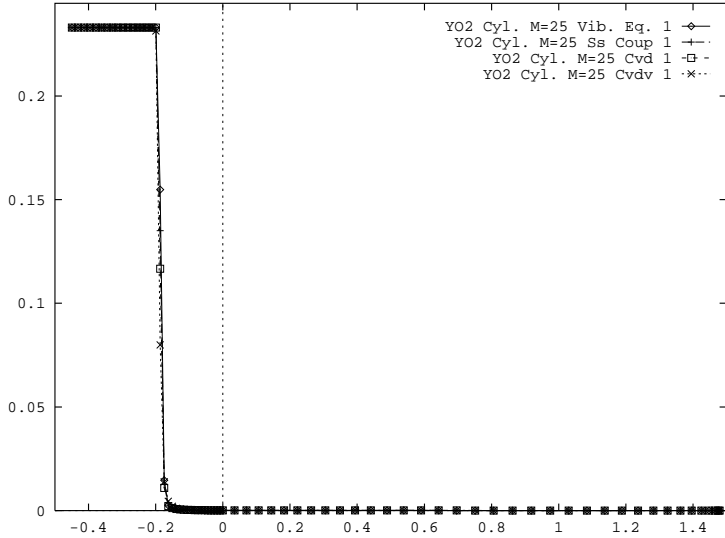


FIG. 27 - Fraction massique de O₂ pour les différents modèles à M_∞ = 25

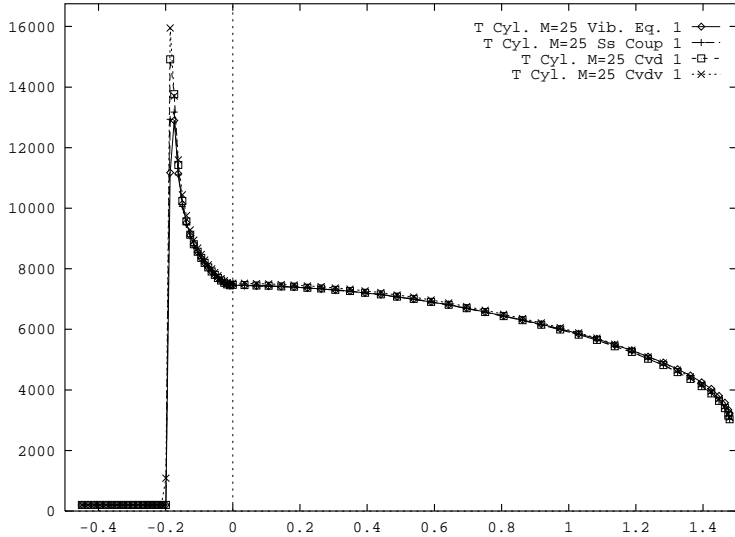


FIG. 28 - Température pour les différents modèles à M_∞ = 25

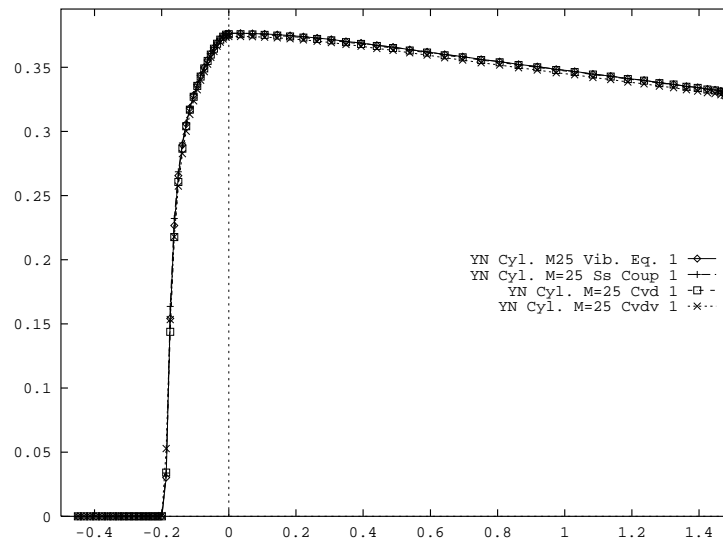


FIG. 29 - Fraction massique de N pour les différents modèles à $M_\infty = 25$

Conclusions

Ce rapport apporte des éléments d'information sur l'influence de la modélisation physique du déséquilibre vibrationnel sur la simulation numérique d'écoulements hypersoniques non visqueux réactifs.

On s'est intéressé, en particulier, aux effets du couplage entre les phénomènes chimiques et vibratoires (couplages CVD et CVDV).

L'écoulement hypersonique autour d'un demi-cylindre a été simulé par une méthode numérique, qui repose sur une formulation Volumes Finis applicable à des maillages non structurés. Ce problème test nous a permis de mettre en évidence pour les nombres de Mach élevés (tels ceux qui caractérisent les écoulements autour d'une navette spatiale à la rentrée dans l'atmosphère), un accroissement notable de la difficulté du problème numérique lorsque les couplages CVD et CVDV sont pris en compte. Le choix des énergies de vibration par unité de volume comme variables dans les équations de relaxation vibrationnelle a été indiqué comme une des raisons de la grande raideur du problème quand le nombre de Mach est élevé. Un changement de variables dans les équations d'évolution des énergies de vibration a donc été proposé, ce qui s'est traduit à la fois par une réduction de la raideur du problème et par une amélioration de la précision de la solution numérique. Ce changement de variables n'est cependant pas applicable lorsqu'on prend en compte le couplage CVDV.

Dans le but d'évaluer de façon qualitative l'effet de la modélisation physique des phénomènes vibratoires dans les écoulements hypersoniques, les résultats numériques obtenus avec différents modèles pour le même problème test que précédemment, respectivement pour un nombre de Mach à l'infini en amont de 15 et 25, ont été comparés. Dans le premier cas ($M_\infty = 15$), on a remarqué que lorsque le déséquilibre vibrationnel est pris en compte le choc tend à s'éloigner du corps et cette tendance est accentuée pour les modèles couplés. Le déséquilibre vibrationnel a aussi l'effet d'augmenter sensiblement le pic de température dans le choc. La modélisation des termes vibratoires influence les températures de vibration des espèces diatomiques, en particulier les valeurs sur le corps de T_{v,N_2} . La composition chimique, qui est aussi influencée par la prise en compte du déséquilibre vibratoire, est notamment sensible au couplage entre les phénomènes chimiques et vibratoires, surtout en ce qui concerne la fraction massique de NO . Lorsque le nombre de Mach à l'infini amont est plus élevé ($M_\infty = 25$), la modélisation des phénomènes de vibration ne semble pas avoir une influence importante : les différences entre les résultats obtenus avec les modèles étudiés sont en effet très faibles. Cela peut être expliqué par le fait que dans cet écoulement l'équilibre vibrationnel est atteint très rapidement après le choc. De plus l'oxygène diatomique se dissocie presque entièrement après le choc.

Enfin, pour autant que l'écoulement étudié est représentatif des écoulements hypersoniques de rentrée, on a observé que si les modèles couplés permettent une analyse plus fine de la couche de choc, leur impact lorsque le nombre de Mach est très grand reste minime.

A Conservation des nouvelles variables à travers un choc

On sait qu'en général la solution au sens faible d'un système d'équations aux dérivées partielles hyperboliques non linéaires dépend de la formulation utilisée. En particulier, les changements de variables non linéaires modifient généralement la solution. En mécanique, il est donc indispensable lorsqu'on change le jeu des variables de vérifier que la solution faible reste celle définie par les trois équations d'Euler sous leur forme habituelle. Dans cette annexe, on vérifie que ceci est bien vrai pour le changement de variables défini à la section 5.2. Avec les nouvelles variables, les équations d'Euler s'écrivent comme à la section 1 à condition de poser :

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho O \\ \rho N \\ \rho NO \\ \mathcal{E}_{vO_2} = \rho e_{vO_2} \\ \mathcal{E}_{vN_2} = \rho e_{vN_2} \end{pmatrix} \quad F_1(W) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho e + p) \\ \rho Ou \\ \rho Nu \\ \rho NOu \\ \mathcal{E}_{vO_2} u \\ \mathcal{E}_{vN_2} u \end{pmatrix} \quad F_2(W) = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho e + p) \\ \rho Ov \\ \rho Nv \\ \rho NOv \\ \mathcal{E}_{vO_2} v \\ \mathcal{E}_{vN_2} v \end{pmatrix}$$

Dans chaque cas la solution faible est définie par la relation de saut qui pour un écoulement bidimensionnel stationnaire s'écrit:

$$\boxed{[F_1 n_x + F_2 n_y] = 0}$$

où \vec{n} est la normale courante sur la ligne de choc.

En particulier, pour la première équation, cette condition implique que le flux massique normal est continu à travers un choc:

$$\boxed{[\rho u n_x + \rho v n_y] = [\rho \vec{V} \cdot \vec{n}] = [flux\ massique\ normal] = 0} \quad [Rankine - Hugoniot]$$

où $[.]$ désigne le saut de la variation d'une grandeur à travers le choc. Des trois équations de la chimie, on déduit de manière analogue que les flux chimiques normaux sont continus à travers le choc :

$$\boxed{[\rho_k u n_x + \rho_k v n_y] = [\rho_k \vec{V} \cdot \vec{n}] = [Y_k \rho \vec{V} \cdot \vec{n}] = [flux\ chimique\ normal] = 0}$$

Or $\rho \vec{V} \cdot \vec{n}$ est continu. Donc Y_k est continu. Ceci prouve que la composition chimique est gelée à travers un choc ainsi qu'il est bien connu. De la même façon, des équations de la vibration écrites en variables conservatives, on déduit que les flux d'énergie vibrationnelle normaux sont continus à travers le choc :

$$\boxed{[\rho_k e_{v,k} u n_x + \rho_k e_{v,k} v n_y] = [\rho_k e_{v,k} \vec{V} \cdot \vec{n}] = [Y_k \rho e_{v,k} \vec{V} \cdot \vec{n}] = [\text{flux vibrationnel normal}] = 0}$$

Comme $\rho \vec{V} \cdot \vec{n}$ et Y_k est continu, $e_{v,k}$ est continu. Ceci implique que les quatre quantités $E_{v,O_2} = \rho_{O_2} e_{v,O_2}$, $E_{v,N_2} = \rho_{N_2} e_{v,N_2}$, $\mathcal{E}_{v,O_2} = \rho e_{v,O_2}$ et $\mathcal{E}_{v,N_2} = \rho e_{v,N_2}$ se conservent. Le changement de variable particulier considéré ici n'affecte donc pas les solutions faibles (en fait, physiquement, le changement est justifié par le fait qu'il n'utilise que des variables qui sont conservées (annexe B)).

B Changement de variable

On rappelle que l'équation de la vibration en forme conservative s'écrit :

$$\boxed{\frac{d\rho_k e_{v,k}}{dt} = (\rho_k e_{v,k})_t + \text{div}(\rho_k e_{v,k} \vec{V}) = \Omega_{v,k}}$$

On opère le changement de variable suivant :

$$\boxed{\mathcal{E}_{v,k} = \rho e_{v,k}}$$

Alors :

$$\frac{d\rho_k \mathcal{E}_{v,k} / \rho}{dt} = \Omega_{v,k}$$

s'écrit :

$$\frac{\rho_k}{\rho} \frac{d\mathcal{E}_{v,k}}{dt} + \mathcal{E}_{v,k} \frac{d\rho_k / \rho}{dt} = \Omega_{v,k} \quad (8)$$

L'équation de conservation de la masse s'écrit :

$$\frac{d\rho}{dt} = 0$$

d'où en injectant dans 8 :

$$\frac{d\rho_k / \rho}{dt} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho_k}{dt} = \frac{\Omega_{c,k}}{\rho}$$

et

$$\frac{\rho_k}{\rho} \frac{d\mathcal{E}_{v,k}}{dt} = \Omega_{v,k} - \frac{\mathcal{E}_{v,k}}{\rho} \Omega_{c,k}$$

Avec les nouvelles variables, l'équation de la vibration s'écrit donc :

$$\boxed{\frac{d\mathcal{E}_{v,k}}{dt} = \frac{\rho}{\rho_k} (\Omega_{v,k} - e_{v,k} \Omega_{c,k})}$$

C'est dire que $\Omega_{c,k}$ disparaît dans le terme des échanges V-T et les termes sources de la vibration deviennent :

$$\Omega_{v,k}^{VT,nouv} = \frac{\mathcal{E}_{v,k}^0 - \mathcal{E}_{v,k}}{\tau_{VT,k}} \quad k=O_2, N_2$$

$$\Omega_{v,k}^{VV,nouv} = \frac{\rho_k}{\tau_{VV} \rho^2 R \theta_{v,k}} (\mathcal{E}_{v,k'} (\mathcal{E}_{v,k} + \rho \mathcal{R}_k \theta_{v,k'}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T} \tau_r} - \mathcal{E}_{v,k} (\mathcal{E}_{v,k'} + \frac{\rho}{\rho'_k} (\frac{\rho'_k}{m'_k} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}}) \mathcal{R} \theta_{v,k}))$$

$$\Omega_{v,k'}^{VV,nouv} = \frac{\rho_k}{\tau_{VV} \rho^2 R \theta_{v,k}} (\mathcal{E}_{v,k} (\mathcal{E}_{v,k'} + \frac{\rho}{\rho'_k} (\frac{\rho'_k}{m'_k} + \frac{\rho_{NO}}{m_{NO}}) \mathcal{R} \theta_{v,k'}) - \mathcal{E}_{v,k'} (\mathcal{E}_{v,k} + \rho \mathcal{R}_k \theta_{v,k}) e^{\frac{\theta_{v,k} - \theta_{v,k'}}{T} \tau_r})$$

Soit :

$$\boxed{\frac{d\mathcal{E}_{v,k}}{dt} = (\mathcal{E}_{v,k})_t + \text{div}(\mathcal{E}_{v,k} \vec{V}) = \Omega_{v,k}^{VT,nouv} + \Omega_{v,k}^{VV,nouv}}$$

C Dérivés partielles de la température par rapport aux densités d'espèce : $\frac{\partial T}{\partial \rho_k}$

Les variables de notre système sont avec les nouvelles variables :

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho O \\ \rho N \\ \rho NO \\ \mathcal{E}_{v,O_2} \\ \mathcal{E}_{v,N_2} \end{pmatrix}$$

Pour calculer $\frac{\partial T}{\partial \rho_k}$, on dérive l'expression de l'énergie par rapport à ρ_k sachant que $k = O, N, NO$:

$$E = \rho e = \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2) + \sum_{k=1}^3 \rho_k h_k^0 + \left[\sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v_k} \right] T + \frac{\rho NO}{\rho} \mathcal{E}_{v,NO} + \frac{\rho O_2}{\rho} \mathcal{E}_{v,O_2} + \frac{\rho N_2}{\rho} \mathcal{E}_{v,N_2}$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \rho_k} \right)_{k=O,N,NO} = 0 = 0 + h_k^0 + \left[C_{v_k} + \frac{\partial \rho_{O_2}}{\partial \rho_k} C_{v_{O_2}} + \frac{\partial \rho_{N_2}}{\partial \rho_k} C_{v_{N_2}} \right] T + \left[\sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v_k} \right] \frac{\partial T}{\partial \rho_k}$$

$$+ \frac{\partial \rho_{NO}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,NO}}{\rho} + \frac{\rho_{NO}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial \rho_k} + \frac{\partial \rho_{O_2}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,O_2}}{\rho} + \frac{\partial \rho_{N_2}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,N_2}}{\rho}$$

Et on écrit que :

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial \rho_k} = \frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \rho_k}$$

ce qui donne finalement :

$$\frac{\partial T}{\partial \rho_k} = - \frac{h_k^0 + \left[C_{v_k} + \frac{\partial \rho_{O_2}}{\partial \rho_k} C_{v_{O_2}} + \frac{\partial \rho_{N_2}}{\partial \rho_k} C_{v_{N_2}} \right] T + \frac{\partial \rho_{NO}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,NO}}{\rho} + \frac{\partial \rho_{O_2}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,O_2}}{\rho} + \frac{\partial \rho_{N_2}}{\partial \rho_k} \frac{\mathcal{E}_{v,N_2}}{\rho}}{\frac{\rho_{NO}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial T} + \sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v_k}}$$

D Calcul de $\frac{\partial \mathcal{E}_{v,k}}{\partial T}$

On procède de même que pour $\frac{\partial T}{\partial \rho_k}$, on dérive l'expression de l'énergie totale par rapport à $\mathcal{E}_{v,k}$. On obtient :

$$0 = \left[\frac{\rho_{NO}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial T} + \sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v_k} \right] \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,k}} + \frac{\rho_{O_2}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,O_2}}{\partial \mathcal{E}_{v,k}} + \frac{\rho_{N_2}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,N_2}}{\partial \mathcal{E}_{v,k}}$$

En conclusion, on a :

$$\boxed{\frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,k}} = - \frac{\frac{\rho_{O_2}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,O_2}}{\partial \mathcal{E}_{v,k}} + \frac{\rho_{N_2}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,N_2}}{\partial \mathcal{E}_{v,k}}}{\frac{\rho_{NO}}{\rho} \frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial T} + \sum_{k=1}^5 \rho_k C_{v_k}}}$$

On donne l'expression de la dérivée de $\mathcal{E}_{v,NO}$ par rapport à la température :

$$\frac{\partial \mathcal{E}_{v,NO}}{\partial T} = \rho \mathcal{R}_{NO} \left[\frac{\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \exp \frac{\theta}{T}}{\left(\exp \frac{\theta}{T} - 1\right)^2} - \frac{\left(\frac{n_{NO}\theta}{T}\right)^2 \exp \frac{n_{NO}\theta}{T}}{\left(\exp \frac{n_{NO}\theta}{T} - 1\right)^2} \right]$$

E Calcul du jacobien de Ω_v

On présente ici le calcul du jacobien de la vibration pour la méthode Pandolfi.

E.1 Le jacobien de Ω_v^{VT}

On dérive le terme source des échanges V-T suivant :

$$\Omega_{v,i}^{VT} = \frac{\mathcal{E}_{v,i}^0 - \mathcal{E}_{v,i}}{\tau_{VT_i}} \quad i=O_2, N_2$$

et on obtient :

$$\frac{\partial \Omega_{v,i}^{VT}}{\partial \mathcal{E}_{v,i}} = \frac{\frac{\partial \mathcal{E}_{v,i}^0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,i}} - 1}{\tau_{VT_i}} - [\mathcal{E}_{v,i}^0 - \mathcal{E}_{v,i}] \frac{\frac{\partial \tau_{VT_i}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,i}}}{\tau_{VT_i}^2} \quad i=O_2, N_2$$

$$\frac{\partial \Omega_{v,i}^{VT}}{\partial \mathcal{E}_{v,j}} = \frac{\frac{\partial \mathcal{E}_{v,i}^0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,j}}}{\tau_{VT_i}} - [\mathcal{E}_{v,i}^0 - \mathcal{E}_{v,i}] \frac{\frac{\partial \tau_{VT_i}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,j}}}{\tau_{VT_i}^2}$$

E.2 Le jacobien de Ω_v^{VV}

On dérive le terme source des échanges V-V suivant ($i = O_2, j = N_2, k = NO$) :

$$\Omega_{v,i}^{VV} = \frac{\rho_j}{\tau_{VV}^{si} \rho^2 R \Theta_{v,j}} (\mathcal{E}_{v,j} (\mathcal{E}_{v,i} + \rho \mathcal{R}_i \Theta_{v,i}) e^{\frac{\theta_{v,j} - \theta_{v,i}}{T}} - \mathcal{E}_{v,i} (\mathcal{E}_{v,j} + \frac{\rho}{\rho_j} (\frac{\rho_j}{m_j} + \frac{\rho_k}{m_k}) \mathcal{R} \Theta_{v,j}))$$

et on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega_{v,i}^{VV}}{\partial \mathcal{E}_{v,i}} &= \frac{\rho_j}{\rho^2 \tau_{ij} R \theta_{v,j}} \left\{ \mathcal{E}_{v,j} e^{\frac{\theta_{v,j} - \theta_{v,i}}{T}} \tau_{VT_i} - \left[1 + (\mathcal{E}_{v,i} + \rho \mathcal{R}_i \theta_{v,i}) \frac{\theta_{v,i} - \theta_{v,j}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,i}} \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[\mathcal{E}_{v,j} + \frac{\rho}{\rho_j} \left(\frac{\rho_j}{m_j} + \frac{\rho_k}{m_k} \right) \mathcal{R} \theta_{v,j} \right] \right\} - \frac{\Omega_{v,i}^{VV}}{\tau_{ij}} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,i}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega_{v,i}^{VV}}{\partial \mathcal{E}_{v,j}} &= \frac{\rho_j}{\rho^2 \tau_{ij} R \theta_{v,j}} \left\{ \left(1 + \mathcal{E}_{v,j} \frac{\theta_{v,i} - \theta_{v,j}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,j}} \right) (\mathcal{E}_{v,i} + \rho \mathcal{R}_i \theta_{v,i}) e^{\frac{\theta_{v,j} - \theta_{v,i}}{T}} - \mathcal{E}_{v,i} \right\} \\ &\quad - \frac{\Omega_{v,i}^{VV}}{\tau_{ij}} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathcal{E}_{v,j}} \end{aligned}$$

On déduit $\Omega_{v,j}^{VV}$, $\frac{\partial \Omega_{v,j}^{VV}}{\partial \mathcal{E}_{v,i}}$, $\frac{\partial \Omega_{v,j}^{VV}}{\partial \mathcal{E}_{v,j}}$ à l'aide de la relation suivante : $\Omega_{v,j}^{VV} = -\frac{\rho_i \theta_j}{\rho_j \theta_i} \Omega_{v,i}^{VV}$

F Routine *Maple* pour le calcul des jacobiens

L'utilisation de méthodes implicites exige de nombreux calculs de jacobiens, souvent fastidieux et parfois sujets à erreurs. On a donc développé deux routines *Maple* qui automatisent le processus et qui produisent un code fortran optimisé directement insérable. Pour effectuer une dérivation dans *Maple* on doit fournir explicitement au logiciel à chaque calcul les variables dont la fonction dépend. Ce qui veut dire que même si l'énergie de vibration E_v dépend de la variable température T (qui elle-même peut dépendre d'autres variables), pour *Maple*:

$$\frac{dE_v}{dT} = 0$$

La première routine créée *explicit*² établit les dépendances de la fonction grâce à une table de dépendances définie par l'utilisateur dont la syntaxe est donnée plus bas. Concrètement, si \rightarrow désigne la dépendance en variables et que E_v dépend de T et que T dépend de ρ , on spécifie dans la table des dépendances :

$$E_v \rightarrow T$$

$$T \rightarrow \rho$$

A chaque occurrence de E_v , E_v est remplacé par $E_v(T(\rho))$. On peut ainsi dériver formellement grâce aux outils standards fournis par *Maple*. Le résultat une fois obtenu, les dépendances sont supprimées par une deuxième routine *implicit*. Ce qui se traduit formellement sur l'exemple précédent par le schéma suivant :

1. $\frac{dE_v}{d\rho}$ – procédure *expli* $\rightarrow \frac{dE_v(T(\rho))}{d\rho}$
2. $\frac{dE_v(T(\rho))}{d\rho}$ – procédure *diff* $\rightarrow E'_v(T(\rho)) \frac{dT(\rho)}{d\rho}$
3. $E'_v(T(\rho)) \frac{dT(\rho)}{d\rho}$ – procédure *impli* $\rightarrow E'_v \frac{dT}{d\rho}$

On montre ci-dessous un fichier *Maple* utilisé et les résultats obtenus, en particulier le code optimisé. Fichier *Maple*:

```
#Contient le programme Maple pour calculer l expression explicite
#et pour generer le code des jacobiens des termes sources
#de la vibration
```

```
#fichier des procedures utiles
read('explimpli.mpl');
```

```
#Table des dependances pour les derivations
```

2. nous remercions M. J. Grimm du projet *Safir* de l'INRIA pour nous avoir suggéré une définition récurrente de la fonction qui en simplifie beaucoup l'écriture

```

#.....

#Supprime toute dependances anterieures
#des fonctions et variables utilisees
tauVV02 := 'tauVV02';
rho02 := 'rho02';
rhoN2 := 'rhoN2';
tauvto2 := 'tauvto2';
EV020 := 'EV020';
tt := 'tt';
p := 'p';
ustau := 'ustau';
rgaz := 'rgaz';
tvo2 := 'tvo2';
tvn2 := 'tvn2';
evo2 := 'evo2';
evn2 := 'evn2';

TablDep := [
  ['rho02', [rho0, rhoN, rhoN0]],
  ['rhoN2', [rho0, rhoN, rhoN0]],
  ['tt', [VarIndSeq]],
  ['p', [rho, tt]],
  ['rgaz', [rho0, rhoN, rhoN0, rho02, rhoN2]],
  ['tvo2', [rho02, EV02]],
  ['tvn2', [rhoN2, EVN2]],
  ['evo2', [rho02, EV02]],
  ['evn2', [rhoN2, EVN2]],
  ['evo2eq', [tt]],
  ['evn2eq', [tt]],
  ['tao2o2', [tt, p]],
  ['tao2o', [tt, p]],
  ['tao2n2', [tt, p]],
  ['tao2n', [tt, p]],
  ['tao2no', [tt, p]],
  ['tan2o2', [tt, p]],
  ['tan2o', [tt, p]],
  ['tan2n2', [tt, p]],
  ['tan2nn', [tt, p]],
  ['tan2no', [tt, p]],
  ['ta', [tt, p]]
];

```

```

#.....
#.....
#
# Termes sources des energies de vibration
# dus aux échanges VV
# Formulation Stupuchenko
#
#.....

#Definition du terme source
#dans l'equation de la vibration de O2
Omegavvo2 := ustau/rho/Rmel/thetan2
*(EVN2*(EV02+rho02*Ro2*thetao2)*exp((thetan2-thetao2)/tt)
-EV02*(EVN2+(rhoN2/xm5 + rhoN0/xm3) * rgaz*thetan2));

#Calcul du terme derive :
dOmegavvo2dEV02 := implicit(simplify(diff(explicit(Omegavvo2), EV02)));

#Generation du code fortran
print('*****dOmegavvo2dEV02*****');
fortran(dOmegavvo2dEV02, optimized);

```

Ci-dessous le résultat de la dérivation formelle fourni par Maple :

```

dOmegavvo2dEV02 :=
-(-dtt dEV02*tt^2*dustaudtt*EVN2*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5
*xm3*EV02-dtt dEV02*tt^2*dustaudtt*EVN2*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5
*xm3*rho02*Ro2*thetao2+dtt dEV02*tt^2*dustaudtt*EV02*EVN2*xm5*xm3
+dtt dEV02*tt^2*dustaudtt*EV02*rgaz*thetan2*rhoN2*xm3+dtt dEV02*tt^2
*dustaudtt*EV02*rgaz*thetan2*rhoN0*xm5-dtt dEV02*tt^2*dustaudp*dpdtt
*EVN2*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*EV02-dtt dEV02*tt^2*dustaudp
*dpdtt*EVN2*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*rho02*Ro2*thetao2
+dtt dEV02*tt^2*dustaudp*dpdtt*EV02*EVN2*xm5*xm3+dtt dEV02*tt^2*dustaudp*
dpdtt*EV02*rgaz*thetan2*rhoN2*xm3+dtt dEV02*tt^2*dustaudp*dpdtt*EV02*rgaz
*thetan2*rhoN0*xm5-ustau*EVN2*exp((thetan2-thetao2)/tt)*tt^2*xm5*xm3
+ustau*EVN2*dtt dEV02*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*EV02*thetan2-ustau
*EVN2*dtt dEV02*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*EV02*thetao2
+ustau*EVN2*dtt dEV02*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*rho02*Ro2*thetao2*thetan2
-ustau*EVN2*dtt dEV02*exp((thetan2-thetao2)/tt)*xm5*xm3*rho02*Ro2*thetao2^2+
ustau*EVN2*tt^2*xm5*xm3+ustau*rgaz*thetan2*tt^2*rhoN2*xm3
+ustau*rgaz*thetan2*tt^2*rhoN0*xm5)/rho/Rmel/thetan2/tt^2/xm5/xm3

```

Le code fortran généré :


```

t1 = tt**2
t2 = dttdEV02*t1
t3 = dustaudtt*EVN2
t8 = exp((thetan2-thetao2)/tt)
t9 = t8*xm5
t15 = xm5*xm3
t16 = rho02*Ro2
t17 = t16*thetao2
t22 = EV02*EVN2*t15
t25 = t2*dustaudtt*EV02
t26 = rgaz*thetan2
t33 = dustaup*dpdtt
t34 = t2*t33
t45 = EV02*rgaz
t54 = ustau*EVN2
t57 = t1*xm5*xm3
t59 = dttdEV02*t8
t60 = t54*t59
t74 = thetao2**2
t80 = ustau*rgaz*thetan2
t87 = -t2*t3*t9*xm3*EV02-t2*t3*t8*t15*t17+t2*dustaudtt*t22+t25*t26
#*rhoN2*xm3+t25*t26*rhoN0*xm5-t34*EVN2*t8*t15*EV02-t2*t33*EVN2*t9*x
#m3*t17+t34*t22+t34*t45*thetan2*rhoN2*xm3+t34*t45*thetan2*rhoN0*xm5
#-t54*t8*t57+t60*t15*EV02*thetan2-t60*t15*EV02*thetao2+t54*t59*xm5*
#xm3*rho02*Ro2*thetao2*thetan2-t60*t15*t16*t74+t54*t57+t80*t1*rhoN2
#*xm3+t80*t1*rhoN0*xm5
t100 = -t87/rho/Rme1/thetan2/t1/xm5/xm3

```

Références

- [1] BLACKMAN V. "Vibrational relaxation in Oxygen and Nitrogen" *Technical report, Palmer Phys. Laboratory, Princeton Univ., 1955.*
- [2] BRESHEARS W.D., BIRD P.F. "Effects of Oxygen Atoms on the Vibrational Relaxation of Nitrogen" *The Journal of Chemical Physics, vol. 48, n. 10, 1968.*
- [3] BRUN R., COLAS P., GUBERNATIS P., ZEITOUN D. "Practical Physico-Chemical Models for High-Speed Air Flow-Field Computations" *Rapport Final Hermès R.D.M.F. 86, June 1989.*
- [4] CICCOLI M.C. "Schémas numériques efficaces pour le calcul d'écoulement hypersoniques réactifs" *Thèse de Doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, Décembre 1992.*
- [5] DERVIEUX A., "Steady Euler simulations using unstructured meshes", *Cours au Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lectures Series 85-04, Partial Differential Equations of Hyperbolic Type and Applications, G. Geymonat Ed., World Scientist, pp. 34-105, 1985.*
- [6] DESIDERI J. A. "The Computation over Unstructured Grids of Inviscid Hypersonic Reactive Flow by Upwind Finite-Volume Schemes" *Computational Methods in Hypersonic Aerodynamics, T.K.S. Murthy Ed., Computational Mechanics Publications, Kluwer Academic Publishers, pp. 388-446, 1991.*
- [7] DESIDERI J.A., GLINSKY N., HETTENA E. "Hypersonic Reactive Flows Computation", *Computers and Fluids, vol.18, no.2, pp. 151-182,1990.*
- [8] DRUGUET M.C. "Contribution à l'étude des écoulements Eulériens hypersoniques en déséquilibre thermo-chimique" *Thèse de Doctorat, Université de Provence (Aix-Marseille I), Novembre 1992.*
- [9] GLINSKY N., "Simulation numérique d'écoulements hypersoniques réactifs hors-équilibre chimique", *Thèse de Doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, nov. 1990.*
- [10] HETTENA E. "Schémas numériques pour la résolution des équations des écoulements hypersoniques à l'équilibre chimique" *Thèse de Doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, Décembre 1989.*
- [11] KIEFER J.H., LUTZ R.W. "The Effect of Oxygen Atoms on the Vibrational Relaxation of Oxygen" *11th Symposium International on Combustion, 1967.*
- [12] LANDAU, TELLER *Phys. Z. Sowjet, 10(34),1936.*
- [13] LOURDEL A. "Effet du couplage chimie-vibration sur la simulation numérique d'écoulements hypersoniques" *Rapport de DEA, 1993.*

- [14] MERLO A., "Méthodes numériques pour le calcul d'écoulements hypersoniques stationnaires en déséquilibre thermique ou instationnaire à l'équilibre." *Non Linear Hyperbolic Problems, Carasso, Charrier, Hanouzet and Joly Eds, Lecture Notes in Physics, vol.170, pp.405-512, Springer-Verlag, Heidelberg, 1982.*
- [15] MILLIKAN R. C., WHITE D. R. "Systematics of vibrational relaxation" *The Journal of Chemical Physics, 39(13):3209-3213, 1963.*
- [16] PARK C. "Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics" *John Wiley and Sons, 1990.*
- [17] SALVETTI M.V. "Modélisation numérique et physique de couches de choc en régime hypersonique" *Thèse de doctorat, Université de Nice Sophia-Antipolis, Mars 1993.*
- [18] STEGER J., WARMING R.F. "Flux vector splitting for the inviscid gas dynamic with applications to finite difference methods" *Journal of Comp. Physics, vol. 40, no. 2, pp. 263-293, 1981.*
- [19] STEVE H., "Schémas implicites linéarisés décentrés pour la résolution des équations d'Euler en plusieurs dimensions", *Thèse de Doctorat, Université de Provence, Juillet 1988.*
- [20] STUPOCHENKO Y.V., LOSEV S.A., OSIPOV A.I. "Relaxation in Shock Waves" *Springer-Verlag, New-York, 1967.*
- [21] TREANOR C.E. & MARRONE P.V. "Effect of Dissociation on the Rate of Vibrational Relaxation" *Physics of Fluids, vol. 5, pp.1022-1026, 1962.*
- [22] THIVET F. "Modélisation de déséquilibre vibrationnel dans un écoulement réactif" *Rapport d'Activité, Laboratoire d'Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion, Septembre-Décembre 1989.*
- [23] THIVET F. "Modélisation et calcul d'écoulements Hypersoniques en déséquilibre chimique et thermodynamique" *Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris, Septembre 1992.*
- [24] Van LEER B. "Flux Vector Splitting for the Euler Equations" *Non Linear Hyperbolic Problems, Carasso, Charrier, Hanouzet and Joly Eds, Lecture Notes in Physics, vol.170, pp.405-512, Springer-Verlag, Heidelberg, 1982.*
- [25] VIJAYASUNDARAM G. "Résolution numérique des équations d'Euler pour des écoulements transsoniques avec un schéma de Godunov en éléments finis" *Thèse de Doctorat, Université Paris VI, 1982.*
- [26] VINCENTI W.G., KRUGER C.H.Jr. "Introduction to Physical Gas Dynamics" *John Wiley & Sons, 1965.*

- [27] ZEL'DOVICH Y.B., RAIZER Y.P. "Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena", *Accademic Press*.



Unité de recherche INRIA Lorraine, Technopôle de Nancy-Brabois, Campus scientifique,
615 rue du Jardin Botanique, BP 101, 54600 VILLERS LÈS NANCY
Unité de recherche INRIA Rennes, Irista, Campus universitaire de Beaulieu, 35042 RENNES Cedex
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, 46 avenue Félix Viallet, 38031 GRENoble Cedex 1
Unité de recherche INRIA Rocquencourt, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex
Unité de recherche INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles, BP 93, 06902 SOPHIA-ANTIPOLIS Cedex

Éditeur

INRIA, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex (France)

ISSN 0249-6399