HAL
open science

Ecoulements euleriens hors-equilibre chimique dans le voisinage d'un point d'arret

Maria-Vittoria Salvetti, Jean-Antoine Desideri

To cite this version:

Maria-Vittoria Salvetti, Jean-Antoine Desideri. Ecoulements euleriens hors-equilibre chimique dans le voisinage d'un point d'arret. [Rapport de recherche] RR-1550, INRIA. 1991. inria-00075011

HAL Id: inria-00075011

https://inria.hal.science/inria-00075011

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.

UNITÉ DE RECHERCHE
INRIA-SOPHIA ANTIPOLIS

Rapports de Recherche

N° 1550

Programme 6
Calcul Scientifique, Modélisation et Logiciel numérique par Ordinateur

ECOULEMENTS EULERIENS HORS-EQUILIBRE CHIMIQUE DANS LE VOISINAGE D'UN POINT D'ARRET

Maria Vittoria SALVETTI
Jean-Antoine DESIDERI

Novembre 1991

Institut National
de Recherche
en Informatique
et en Automatique

Domaine de Voluceau
Rocquencourt
B.P. 105
78153 Le Chesnay Cedex
France
Tél.:(1) 39 63 55 11

RR-1550

ECOULEMENTS EULERIENS HORS-EQUILIBRE CHIMIQUE DANS LE VOISINAGE D'UN POINT D'ARRET

INVISCID NON EQUILIBRIUM FLOWS IN THE VICINITY OF A STAGNATION POINT

Maria Vittoria SALVETTI
Jean-Antoine DESIDERI

INRIA
Centre de Sophia-Antipolis
2004, Route des Lucioles
06560 Valbonne, France

1 RESUME/ABSTRACT

Dans cette étude, on se propose de donner une explication théorique à un "paradoxe" concernant le comportement au point d'arrêt de solutions numériques obtenues par les méthodes conventionnelles de calcul d'écoulements eulériens hors-équilibre. Ce "paradoxe" concerne la relation entre les solutions des modèles d'équilibre et de hors-équilibre chimique, et fut soulevé par plusieurs experts lors du "Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I. Antibes 1990" [7].

Dans une première partie, on montre qu'au point d'arrêt les conditions d'équilibre chimique sont atteintes et on analyse la sensibilité de ces conditions d'équilibre aux différentes variables caractérisant l'écoulement.

Dans une deuxième partie, on développe une analyse du comportement de la solution mathématique du problème d'écoulement hors-équilibre dans le voisinage du point d'arrêt, ce qui permet de donner une explication au "paradoxe" décrit.

Ensuite, une procédure d'intégration numérique des équations de convection d'espèces projetées sur la ligne de courant du point d'arrêt et paramétrées par le du temps lagrangien, donne un support numérique aux prévisions théoriques.

On propose également deux procédures d'intégration numérique qui permettent de recalculer, à partir des conditions d'équilibre au point d'arrêt, les variables caractéristiques de l'écoulement au corps. Les limites de validité de ces procédures sont analysées et les résultats obtenus pour un cas test du Workshop [1] sont comparés avec les résultats fournis par plusieurs contribuants.

Enfin, on examine sommairement ce que peuvent être les conséquences du comportement local de la solution sur le couplage à une procédure de calcul de couche limite.

The aim of this study is to give a theoretical rationale of a "paradox" related to the behavior at the stagnation point of some numerical solutions obtained by conventional methods for Eulerian non-equilibrium flows. This "paradox" concerns the relationship between the solutions given by equilibrium and non-equilibrium models and was raised by several experts during the "Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I. Antibes 1990" [7].

In the first part, we show that equilibrium conditions are reached at the stagnation point and we analyse the sensitivity of these equilibrium conditions to the flow variables.

In the second part, we develop an analysis of the behavior of the mathematical solution to an Eulerian non-equilibrium flow in the vicinity of the stagnation point, which gives an explanation to the described "paradox".

Then, a numerical procedure, integrating the species convection equations projected on the stagnation point streamline in a Lagrangian time approach, gives a numerical support to the theoretical predictions.

We also propose two numerical integration procedures, that allow us to recompute, starting from the equilibrium conditions at the stagnation point, the flow characteristics at the body. The validity limits of these procedures are discussed and the results obtained for a Workshop test-case [1] are compared with the results given by several contributors.

Finally, we survey briefly the influence of the local behavior of the solution on the coupling technique to a boundary layer calculation.

Table des matières

1 RESUME/ABSTRACT **1**

2 AVANT PROPOS **2**

3 "LE PARADOXE DU POINT D'ARRET" **3**

3.1 Introduction 3

3.2 Etude de l'état d'équilibre à enthalpie donnée 8

3.3 L'effet d'un raffinement de maillage sur la solution conventionnelle 11

4 L'EXPLICATION THEORIQUE **12**

5 EVALUATION DES PARAMETRES d_i **16**

5.1 Sensibilité aux paramètres globaux de l'écoulement 16

6 L'APPROCHE NUMERIQUE EN AMONT DU POINT D'ARRET 18

6.1 Résultats numériques 19

6.1.1 Un cas représentatif 19

6.1.2 Sensibilité aux paramètres globaux de l'écoulement . . . 20

7 L'INTEGRATION NUMERIQUE SUR LE CORPS **22**

7.1 Une première procédure 22

7.1.1 Résultats numériques 24

7.2 Une procédure d'intégration de validité plus générale 25

7.2.1 Résultats numériques 26

8 IMPACT **28**

9 CONCLUSIONS **29**

10 ANNEXE I **31**

11 ANNEXE II **33**

12 TABLEAUX **35**

13 FIGURES **38**

2 AVANT PROPOS

Bien avant nous, en 1970, Marcel Vinokur a proposé une analyse asymptotique de l'écoulement eulérien hors équilibre autour d'un corps arrondi symétrique dans le voisinage d'un point d'arrêt [16].

Notre analyse qui a été développée indépendamment, s'apparente bien évidemment à la sienne sur certains points, notamment par le fait que la vitesse dans ce voisinage est bien approchée par une fonction linéaire de la coordonnée d'espace. (Nous le justifions par l'approximation locale d'écoulement incompressible.) Cependant, le développement en série des grandeurs (notamment du terme source) autour des conditions d'équilibre est conduit différemment. Pour cette raison, on trouve des solutions asymptotiques différentes. Néanmoins, comme lui, on démontre que certaines variables d'état, et en particulier les fractions massiques et la température, peuvent avoir au point d'arrêt, un gradient infini.

D'autre part, on a conduit une expérimentation sur la sensibilité des phénomènes aux paramètres globaux de l'écoulement qui, à notre connaissance, est originale.

3 "LE PARADOXE DU POINT D'ARRET"

3.1 Introduction

L'étude a pour origine la simulation numérique des écoulements réactifs "hors-équilibre" autour de corps arrondis, tels qu'ils se produisent dans le voisinage du nez d'un engin spatial hypersonique dans la phase de rentrée. De tels écoulements sont le siège de phénomènes physico-chimiques complexes tels que la relaxation chimique et thermique derrière un choc très fort, ainsi que les effets à la paroi (généralement partiellement catalytique), dont la modélisation appartient encore aujourd'hui au domaine de la recherche. La communauté scientifique est directement concernée par le problème de la "validation". Il s'agit de valider la connaissance de certains écoulements par confrontation de résultats d'expérience aux résultats de calcul, mais aussi d'évaluer le potentiel et les limitations des méthodologies numériques par une analyse critique comparée des résultats de calcul entre eux. Il ne fait aucun doute qu'un contexte aussi complexe ne peut être décrit de manière fine et fiable que par une modélisation mathématique contenant au moins les équations de Navier-Stokes couplées aux équations modélisant les phénomènes physico-chimiques. Néanmoins, dans le processus de validation, il est interessant pour plusieurs raisons de progresser par étapes de complexité moindre. Tout d'abord il serait difficile de valider l'approche numérique directement sur le modèle pressenti comme suffisamment complexe, car des modèles plus simples offrent déjà un défi à l'analyse numérique. D'autre part, a priori on ne connait pas exactement le modèle nécessaire et suffisant, et résoudre des modèles simplifiés de complexité progressive sert à l'identifier. Enfin, d'un point de vue industriel, cette démarche permet d'évaluer le rapport entre le coût et la complexité du modèle retenu. Pour ces raisons, il est apparu interessant de confronter les méthodologies numériques sur la base de "cas tests" dont la définition de certains impose une modélisation de l'écoulement par les équations d'Euler, même si ce jeu d'équations peut apparaître à la lumière de nos connaissances actuelles comme insuffisant.

On s'intéresse ici à la <u>solution exacte</u> d'un problème d'écoulement réactif non visqueux, dont la dissociation chimique est traitée par un modèle "hors-équilibre". Ceci signifie qu'aux équations d'Euler on adjoint des équations de convection d'espèces du type:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + div(\rho_s \vec{V}) = \Omega_s$$

où s est l'indice d'une espèce chimique, ρ_s est la masse volumique partielle de cette espèce ($\rho_s = \rho Y_s$, où Y_s est la fraction massique), et Ω_s est le taux de

production de l'espèce. Dans le cas d'un couplage aux équations d'Euler, on a naturellement négligé les diffusions d'espèces. Dans notre modèle, on néglige aussi l'ionisation. Les espèces retenues sont pour $s = 1, ..., 5$ respectivement : O, N, NO, O_2 et N_2. Les réactions chimiques étudiées (au total 17) s'écrivent :

$$\begin{array}{rcll} O_2 + X & \rightleftharpoons & O + O + X & \\ N_2 + X & \rightleftharpoons & N + N + X & \\ NO + X & \rightleftharpoons & N + O + X & \text{Modèle de} \\ NO + O & \rightleftharpoons & O_2 + N & \text{Zel'dovich [19]} \\ N_2 + O & \rightleftharpoons & NO + N & \\ N_2 + O_2 & \rightleftharpoons & NO + NO & \end{array}$$

où X représente un agent de collision qui peut être n'importe quelle espèce parmi les cinq présentes. La création d'espèces à partir de N_2 et O_2 est endothermique, les réactions correspondantes auront donc pour effet de baisser fortement la température.

Par définition des fractions massiques, on a :

$$\sum_{s=1}^{5} Y_s = 1$$

Dans la résolution des équations on a utilisé le fait que le nombre global d'atomes de N et O est conservé. Cela se traduit par:

$$\frac{\frac{Y_{N_2}}{m_n} + \frac{Y_N}{m_N} + \frac{Y_{NO}}{m_{no}}}{\frac{Y_{O_2}}{m_O} + \frac{Y_O}{m_O} + \frac{Y_{NO}}{m_{NO}}} = \frac{79}{21}$$

car l'air non dissocié se compose de 79% d'azote et de 21% d'oxygène.
Par combinaison de (2) et de (3), on obtient :

$$\begin{cases} Y_4 = \frac{24}{103} - Y_1 - \frac{8}{15} Y_3 \\ \\ Y_5 = \frac{79}{103} - Y_2 - \frac{7}{15} Y_3 \end{cases}$$

Ceci nous autorise à résoudre seulement trois équations de bilan d'espèces, prenant Y_1, Y_2, Y_3 comme seules inconnues indépendantes .
L'expression du taux de production Ω est définie par un modèle de cinétique chimique, on utilise ici le modèle de Park [11]. Mathématiquement,

$$\Omega_s = \Omega_s(\rho, T, Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5).$$

(Voir [6] pour une description plus détaillée).

Incidemment, l'identification d'un modèle de dissociation de l'air uniformément satisfaisant sur une plage de température allant jusqu'à plus de 20 000 K, constitue un problème encore non complètement résolu ([4]-[11]-[12]-[13]-[18] etc). Cet aspect du problème est volontairement écarté de l'étude présente où l'on ne cherche pas à évaluer l'adéquation du modèle de chimie à l'écoulement réel, mais à examiner la potentialité d'une approche numérique conventionnelle à résoudre correctement un problème de nature mathématique.

Les phénomènes de dissociation sont caractérisés par la vitesse de relaxation chimique ou inversement par le temps caractéristique de relaxation $\tau_{RELAXATION}$, que l'on peut lier à la matrice jacobienne

$$\Omega' = \frac{\partial \Omega_i}{\partial \rho_j}$$

On peut poser:

$$\tau_{RELAXATION} = |\lambda(\Omega')|^{-1}$$

où $|\lambda(\Omega')|$ est une valeur propre de la matrice Ω'. Dans le modèle "hors-équilibre" ces valeurs propres peuvent être localement grandes (notamment près du point d'arrêt) mais restent finies; on parle alors de chimie à "vitesse finie" ("finite-rate chemistry").

Après quelques manipulations triviales utilisant l'équation de conservation de la masse, on peut écrire l'une quelconque des équations de bilan d'espèces sous la forme:

$$\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t} Y_s = \Omega_s / \rho$$

où $\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{D}t}$ est la dérivée particulaire. Cette équation projetée sur une ligne de courant prend une forme d'équation différentielle ordinaire, et on s'attend à l'infini aval à ce que le terme source s'annule:

$$\Omega_s \to 0.$$

Cette limite ne traduit pas l'absence de réactions chimiques, mais au contraire l'équilibre chimique dont la composition s'exprime en fonction de la pression locale, ou des valeurs locales de ρ et de T (loi d'action de masse).

Le temps caractéristique de la convection est lié à la vitesse matérielle V et à une longueur de référence L qui peut être le rayon de courbure du corps arrondi au point d'arrêt:

$$\tau_{TRANSIT} = L/V.$$

Il est donc naturel d'introduire le paramètre suivant, dit nombre de Damkhöler:

$$Da = \frac{\tau_{TRANSIT}}{\tau_{RELAXATION}} = \frac{L}{V} \times |\lambda|.$$

Lorsque le corps est de grande taille ("L grand"), le nombre de Damkhöler est grand, et l'état d'équilibre que l'on prévoit sur une ligne courant en général à l'infini aval, est ici quasiment déjà atteint à une courte distance après le choc (voir [3]-[6] pour une discussion plus approfondie de la limite "équilibre".) Dans ce cas, on peut chercher à calculer l'écoulement réactif entier par un couplage des équations d'Euler aux équations de loi d'action de masse symbolisées par l'équation (vectorielle):

$$\Omega = 0.$$

On obtient alors un "algorithme équilibre".

Dans un écoulement "hors-équilibre" non-trivial, Ω n'est pas nul partout, mais on constate que les équations de bilan, mises sous la forme faisant intervenir la dérivée particulaire, à savoir,

$$\frac{\partial}{\partial t}(Y_s) + \vec{V} \cdot \nabla (Y_s) = \Omega_s/\rho \ ,$$

dégénèrent à l'état stationnaire en

$$\Omega = 0,$$

en tout point où

$$V = 0,$$

c'est à dire en pratique, au point d'arrêt. En fait, on peut retrouver ce résultat autrement en considérant le temps de transit d'une particule le long de la ligne de courant à partir d'un point (dans la couche de choc) d'abscisse $s_0 < 0$ jusqu'au point d'arrêt ($s_1 = 0$), qui s'évalue par l'intégrale:

$$\tau(s_0) \ = \int_{s_0}^{0} \frac{ds}{V(s)}$$

Dans le voisinage du point d'arrêt on peut considérer l'écoulement incompressible et le profil de vitesse linéaire (voir paragraphe 4); on obtient donc que $\tau(s_0) = \infty$. D'un point de vue physique, la particule en parvenant au point d'arrêt par un parcours en temps infini y atteint les conditions d'équilibre chimique (et thermique, si le modèle contient d'autres équations de convection ayant la même forme, par exemple pour les états d'énergie vibrationnelle).

En toute rigueur, l'état d'équilibre du point d'arrêt est différent de celui qu'on obtient, pour une géométrie et des conditions amont identiques, dans un écoulement partout à l'équilibre. Néanmoins, on s'attend à ce que l'écart soit faible car en pratique, les variations de pression en ce point sont elles-mêmes faibles d'un cas à l'autre. Or l'expérience par des méthodes numériques

conventionnelles de type volumes-finis est en contradiction flagrante avec cette prévision. Cette contradiction est clairement apparue de l'analyse des résultats présentés au "Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I. Antibes 1990" [7]. En particulier, les contribuants ont en moyenne trouvé une température au point d'arrêt de l'ordre de 6000 K pour l'écoulement à l'équilibre, et de l'ordre de 9000 K pour l'écoulement hors équilibre, les conditions à l'infini amont et la géométrie étant les mêmes. Cet écart considérable défie l'intuition physique, et fut soulevé comme un paradoxe "numérique" par plusieurs experts lors du Workshop.

Cette étude apporte une explication théorique à ce phénomène numérique lié au comportement de la solution mathématique du problème eulérien dans le voisinage du point d'arrêt.

Pour mieux présenter le problème dans son contexte, avant d'apporter cette explication, on présente dans les sections suivantes quelques remarques sur l'état d'équilibre au point d'arrêt et l'illustration du paradoxe numérique.

3.2 Etude de l'état d'équilibre à enthalpie donnée

Afin d'établir si l'écart considérable observé au point d'arrêt entre la température calculée pour un écoulement à l'équilibre et celle trouvée pour un écoulement hors-équilibre peut être justifié par la petite différence entre les deux valeurs de la pression locale (voir paragraphe précédent), on a conduit une étude de sensibilité de l'état d'équilibre au point d'arrêt.
On constate qu'il existe en ce point 8 variables inconnues (les fractions massiques des espèces $Y_O, Y_N, Y_{NO}, Y_{O_2}, Y_{N_2}$, la pression p, la masse volumique du mélange ρ et la température T) et qu'on peut écrire les 7 équations suivantes:

- conservation des atomes de N,

$$\frac{Y_N}{M_N} + \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} + 2\,\frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}} = 2\,(\frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}})_\infty = \frac{2 \times 79}{79 \times 28 + 21 \times 32} \tag{1}$$

- conservation des atomes de O,

$$\frac{Y_O}{M_O} + \frac{Y_{NO}}{M_{NO}} + 2\,\frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} = 2\,(\frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}})_\infty = \frac{2 \times 21}{79 \times 28 + 21 \times 32} \tag{2}$$

- loi d'état pour un mélange de gaz parfaits,

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{s=1}^{5} \frac{Y_s}{M_s} \tag{3}$$

- conservation de l'enthalpie totale spécifique (toujours vraie pour un écoulement eulérien stationnaire même réactif)

$$\sum_{s=1}^{5} Y_s C_{p_s} T + \sum_{s=1}^{3} Y_s h_s^0 + \sum_{s=3}^{5} Y_s \frac{R_s \Theta_s}{exp(\frac{\Theta_s}{T} - 1)} = H_\infty \tag{4}$$

(on a supposé les énergies vibrationnelles des molécules à l'équilibre à la température de translation-rotation T)

- 3 équations de loi d'action de masse,

$$\Omega_1\,(\rho, Y, T) = 0 \tag{5}$$

$$\Omega_2\,(\rho, Y, T) = 0 \tag{6}$$

$$\Omega_3\,(\rho, Y, T) = 0 \tag{7}$$

La valeur de H_∞ est calculée en fonction des conditions à l'infini amont: on a utilisé les mêmes conditions que dans les cas tests 6.2-3 et 6.3-4 de [1] (M_∞ = 25, altitude 75000 m).

Le jeu d'équations (1-7) est évidemment indéterminé. On ne peut pas connaître les conditions au point d'arrêt sans spécification complète de la géométrie et un calcul global de l'écoulement.

Cependant, on peut exprimer les conditions en fonction de l'une quelconque des variables (qui restent toutes inconnues). En pratique, on a résolu ce système pour différentes valeurs de masse volumique dans une large plage de variations.

Tout d'abord, on constate que les variations relatives de pression et de masse volumique sont presque égales (figure 1). Par conséquent, la sensibilité de l'état d'équilibre aux variations de masse volumique ou de pression est équivalente. D'autre part, on sait que la pression au point d'arrêt varie seulement de quelques pourcents d'un cas d'équilibre chimique à un cas de hors-équilibre. Par conséquent, la plage de variation relative de ρ/ρ_∞ de 5 à 50, que l'on a utilisé pour cette étude, contient largement les variations observées en pratique. Dans cet intervalle, on constate que T reste inférieur à 6000K et Y_N quasiment constant (figures 2-3).

Par ailleurs, la théorie de la couche mince montre que l'approximation $C_p = 2$ fournit une borne supérieure sur la valeur de la pression au point d'arrêt. En effet, pour un écoulement hypersonique autour d'un corps à incidence nulle, le long de la ligne de courant du point d'arrêt, le choc peut être considéré normal à la vitesse, et on peut écrire la relation de saut suivante:

$$p_\infty + \frac{1}{2}\rho_\infty V_\infty^2 = p_s + \frac{1}{2}\rho_s V_s^2$$

où s indique les conditions immédiatement après le choc. Or dans l'approximation de couche de choc infiniment mince (hypothèse de Newton), ces conditions sont celles du point d'arrêt, où $V_s \simeq 0$ et:

$$C_p = \frac{p_s - p_\infty}{\frac{1}{2}\rho_\infty V_\infty^2} \simeq 2$$

Cette valeur fournit bien une borne supérieure sur la valeur de la pression au point d'arrêt, parce qu'elle suppose la transformation de l'énergie cinétique à l'infini amont entièrement en saut de pression entre le point d'arrêt et l'écoulement à l'infini amont. De plus, cette majoration de la pression fournit une borne sur la température d'équilibre, qui est une fonction croissante de la pression (voir figures 1 et 2).

On peut étudier cette borne en fonction de l'altitude et M_∞ , et on remarque (fig. 4) que, pour une large plage de valeurs du nombre de Mach et

de l'altitude, elle reste inférieure à 6000 K (en particulier dans les conditions décrites précédemment).

On a donc démontré la faible sensibilité des conditions d'équilibre à la valeur locale de la pression, qui est elle-même quasiment fixée par les conditions amont.

Cette partie permet donc de confirmer que les valeurs de la température au point d'arrêt pour les solutions exactes des modèles "équilibre" et "hors-équilibre", sont voisines, comme l'intuition physique nous le laissait pressentir. Donc, les deux approches numériques devraient fournir des résultats voisins en ce point.

De plus, comme l'approximation Newtonienne nous a permis d'obtenir une majoration de la température au point d'arrêt, cette étude a démontré que c'est la valeur de la température fournie par la résolution numérique du modèle "hors-équilibre" qui est notablement sur-estimée.

3.3 L'effet d'un raffinement de maillage sur la solution conventionnelle

Dans le paragraphe précédent on a montré que la valeur numérique de la température au point d'arrêt obtenue par résolution numérique du modèle hors-équilibre était notablement trop élevée, dans les solutions fournies par de nombreux contribuants à un Workshop récent [7]-[1]. Afin d'étudier ce phénomène et la sensibilité de cette solution numérique à la dimension du maillage, on a considéré un maillage très fin (281 $\times$ 101 points) autour d'un obstacle 2-D parabolique de 1 m à $M_\infty = 25$ et à une altitude de 75000 m (figure 5).

L'écoulement hors-équilibre a été calculé par la méthode Eléments Finis/ Volumes Finis décrite dans [5]-[6]-[15].

On représente (figures 6 et 7) les coupes en fonction de l'abscisse curviligne s le long de la ligne de courant du point d'arrêt de la fraction massique de l'espèce N et de la température T. Sur la base de l'étude de l'état d'équilibre (voir paragraphe précédent) au point d'arrêt , $s = 0$, on devrait avoir $Y_N = 0.44$ et $T = 5750$ K. On constate un écart important (2000 K sur T). Ces expériences de raffinement de maillage ont été effectuées par Marie-Claude Ciccoli.

On remarque donc, que les solutions numériques obtenues pour un écoulement à l'équilibre et pour un écoulement hors-équilibre sont très distantes, même dans le cas d'un maillage très fin.

Il y a donc effectivement paradoxe.

4 L'EXPLICATION THEORIQUE

On se propose, dans ce paragraphe, de donner une explication au paradoxe numérique décrit précédemment, par l'analyse du comportement de la solution mathématique du problème dans le voisinage du point d'arrêt.

Tout d'abord on remarque qu'à l'état stationnaire l'équation de continuité elle-même dégénère au point d'arrêt en:

$$\operatorname{div} \vec{V} = 0$$

qui traduit la condition d'incompressibilité. En conséquence, il apparait qu'on peut approcher l'écoulement dans un voisinage de ce point par un écoulement incompressible, comme l'a suggéré Pandolfi [10]. Dans cette approximation ρ est constant sur une ligne de courant et le profil de vitesse est linéaire (figure 8b):

$$\rho = \rho(s) = constante$$

$$V = V(s) = k|s|$$

où s est l'abscisse curviligne mesurée à partir du point d' arrêt ($s < 0$ en amont, $s > 0$ sur le corps) (voir figure 8a).

Les équations stationnaires de bilan d'espèces:

$$\rho \vec{V} \cdot \nabla Y = \Omega(\rho, Y, T)$$

où $Y = (Y_1, Y_2, Y_3)^T$ et $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)^T$, s'écrivent alors en amont ($s < 0$), en projection sur la ligne de courant du point d'arrêt, de la façon suivante:

$$-\rho\, k\, s \frac{dY(s)}{ds} = \Omega\left(T\left(s, Y(s)\right),\ Y(s)\right) \tag{8}$$

On remarque que dans cette équation, valable au voisinage du point d'arrêt, la dépendance formelle de Ω sur ρ a été supprimée car la masse volumique est constante sur la ligne de courant.

En ce qui concerne la température, l'équation de l'énergie (conservation de l'enthalpie totale),

$$\frac{1}{2}k^2 s^2 + C_p(Y)T + h_0 Y + H_{VIB}(Y,T) = H_\infty \tag{9}$$

en fait une fonction implicite de la composition chimique et de l'abscisse curviligne au carré: $T = f(Y, s^2)$.

On se propose d'étudier le comportement de l'équation (8) par linéarisation du terme de source autour de la condition d'équilibre au point d'arrêt: $\Omega = \Omega_0 = 0$. On peut alors écrire:

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{\partial \Omega}{\partial Y}(Y - Y_0) + \frac{\partial \Omega}{\partial T}(T - T_0)$$

où l'on a négligé les variations du second ordre. En linéarisant aussi l'incrément de température, on obtient:

$$\Omega - \Omega_0 = \frac{\partial \Omega}{\partial Y}(Y - Y_0) + \frac{\partial \Omega}{\partial T}[\frac{\partial T}{\partial Y}(Y - Y_0) + \frac{\partial T}{\partial s} s]$$

On remarque que les dérivées partielles $\frac{\partial T}{\partial Y}, \frac{\partial T}{\partial s}$ peuvent être calculées par différentiation de la relation (9) et qu' en particulier, la dérivée partielle par rapport à l'abscisse s est nulle au point d'arrêt, car la température est fonction de s^2. En rappellant aussi que $\Omega_0 = 0$, on peut écrire l'expression linéarisée du terme de source suivante:

$$\Omega = (\frac{\partial \Omega}{\partial Y} + \frac{\partial \Omega}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial Y})(Y - Y_0) = \Omega'_0 (Y - Y_0)$$

où $\Omega'_0 = (\frac{\partial \Omega}{\partial Y} + \frac{\partial \Omega}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial Y})_0$ peut être considéré comme le "Jacobien total" du terme de source par rapport aux fractions massiques des espèces, car il reflète aussi la variation de la température due à la variation de la composition.

La linéarisation de l'équation (8) prend donc en amont du point d'arrêt la forme:

$$\frac{dY}{ds} = -\frac{\Omega'_0}{\rho k s}(Y - Y_0) \tag{10}$$

Ensuite, en diagonalisant la matrice Ω'_0, on obtient:

$$\Omega'_0 = T \Lambda T^{-1}$$

où la matrice Λ est diagonale et ses éléments sont les valeurs propres de Ω'_0. On peut supposer que tels éléments sont réels et négatifs, car l'état d'équilibre est attractif (on a vérifié cette conjecture a posteriori par calcul numérique de ces valeurs, voir paragraphe 5).

On introduit alors la matrice diagonale suivante:

$$D = -\frac{\Lambda}{\rho k}$$

dont les éléments diagonaux d_i sont positifs et peuvent être considérés comme des nombres de Damkhöler, car ils représentent le rapport entre un temps caractéristique de relaxation chimique et un temps de convection. En effet, les temps de relaxation chimique sont inversement proportionels aux éléments de la matrice $\frac{\Lambda}{\rho}$ (voir paragraphe 3.1) et le temps caractéristique de la convection, lié à la vitesse matérielle et à une longueur de référence, peut être exprimé dans l'étude présente comme le rapport $-\frac{s}{ks} = -\frac{1}{k}$.

On peut donc réécrire l'équation (10) sous la forme:

$$\frac{d}{ds}(T^{-1}(Y - Y_0)) = \frac{DT^{-1}(Y - Y_0)}{s}$$

qui s'intègre à vue et donne la solution suivante:

$$T^{-1}(Y - Y_0) \;=\; (-s)^D C \qquad (s < 0)$$

où C est un vecteur de constantes, et où l'on a posé pour simplifier l'écriture:

$$|s|^D \;=\; \begin{pmatrix} |s|^{d_1} & 0 & 0 \\ 0 & |s|^{d_2} & 0 \\ 0 & 0 & |s|^{d_3} \end{pmatrix}$$

Finalement on obtient:

$$Y \;=\; Y_0 \;+\; T\,(-s)^D\,C \qquad (s < 0) \tag{11}$$

En conclusion, les écarts entres les valeurs des fractions massiques de chaque espèce et les conditions d'équilibre sont des combinaisons linéaires des fonctions puissances $|s|^{d_i}$, où les exposants d_i sont des nombres de Damkhöler. Le comportement des fractions massiques dans le voisinage du point d'arrêt dépend donc de la valeur de ces paramètres . En effet, l'expression de la dérivée $\frac{dY}{ds}$ est la suivante:

$$\frac{dY}{ds} \;=\; -T\,(-s)^{D-I}\,C \qquad (s < 0) \tag{12}$$

Si l'on s'intéresse à la limite de telle dérivée pour $s \to 0^-$ et donc à la pente locale des courbes des fractions massiques dans un voisinage amont du point d'arrêt, on peut mettre en évidence les deux cas suivants:

(i) si tous les paramètres d_i sont > 1 alors $\frac{dY}{ds}|_{s\to 0^-} \;=\; 0$ et les fractions massiques ont un comportement régulier,

(ii) si $min\ d_i < 1$ alors $\frac{dY}{ds}|_{s\to 0^-} = \infty$. Le comportement de la fraction massique d'une espèce influencée par le mode propre associé à $min\ d_i$ est représenté à la figure 9a.

On remarque que théoriquement, l'expression (12) n'exclut pas une pente des fractions massiques finie et non nulle, si l'un des paramètres d_i est strictement égal à 1. Cependant, on a pas réussi dans cette étude à illustrer numériquement cette possibilité théorique.

Dans un voisinage en aval du point d'arrêt ($s > 0$), l'équation linéarisée prend la forme

$$\frac{d}{ds}(T^{-1}(Y - Y_0)) = -\frac{DT^{-1}(Y - Y_0)}{s} \quad (s > 0)$$

dont la solution générale est:

$$Y = Y_0 + T\,(s)^{-D}\,C' \quad (s > 0)$$

La seule solution bornée de l'équation précédente correspond à $C' = 0$, c'est à dire à la solution $Y = Y_0$.

L'analyse conduite offre donc une explication théorique au paradoxe mis en évidence aux paragraphes précédents: on a montré, en effet, que pour des écoulements hors-équilibre chimique tels qu'un des d_i soit plus petit que l'unité, la courbe des valeurs de la fraction massique des espèces influencées par le mode propre associé à tel paramètre a une dérivée infinie dans un voisinage en amont du point d'arrêt.

Dans ce cas, la dérivée normale d'au moins une fraction massique est infinie sur le corps, ce qui permet d'identifier une sorte de "couche limite chimique", dont il est difficile de définir l'épaisseur en toute généralité.

En ce qui concerne la solution numérique, cela se traduit par la sous-estimation de telles fractions massiques, due à la troncature liée à la dimension finie de la maille, et, en conséquence, à une valeur numérique trop élevée de la température au point d'arrêt (voir paragraphe 3.2).

Dans la suite, on montrera, par une approche d'intégration numérique lagrangienne en amont du point d'arrêt et par une évaluation numérique des paramètres d_i, que, pour des valeurs des paramètres globaux typiques des écoulements autour d'un engin spatial lors d'une rentrée atmosphérique, la solution dans un voisinage du point d'arrêt a effectivement le comportement décrit au point *(ii)*.

5 EVALUATION DES PARAMETRES d_i

L'analyse du comportement de la solution mathématique du problème dans le voisinage du point d'arrêt, développée dans le paragraphe précédent, a mis en évidence que la pente des coupes des fractions massiques et de la température au point d'arrêt dépend des valeurs des "nombres de Damkhöler" d_i définis par:

$$d_i = \frac{\lambda_i}{k}$$

où λ_i est la i-ème valeur propre de la matrice Jacobienne "totale" des trois termes sources des équations de convection des espèces:

$$\Omega'_0 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \Omega}{\partial Y_i}$$

où les dérivées partielles sont calculées à $\rho =$ constante.

Incidemment, on remarque que dans notre méthode de Volumes Finis, dite "à couplage faible" parce qu'on y traite les équations d'Euler et les équations de bilan d'espèces en deux sous-pas successifs, les termes sources Ω sont implicités au moyen précisément du Jacobien total de manière à tenir compte du raffraichissement de la température (par résolution de l'équation de l'énergie) à la suite du sous-pas "Euler". Cet élément est d'ailleurs perçu comme essentiel au renforcement du couplage dans une telle approche [5].

On connait donc l'expression de la matrice Ω'_0 en fonction de la valeur au point d'arrêt de la pression, tout autre variable chimique ou thermodynamique étant calculée en supposant l'équilibre chimique (équations (1)-(7)). Les valeurs propres sont calculées par une procédure numérique.

Pour l'estimation de la pente de la vitesse au point d'arrêt k, on a utilisé une procédure d'interpolation des valeurs numériques de la vitesse le long de la ligne de courant, qui sera décrite en détail dans la suite (voir paragraphe 6).

5.1 Sensibilité aux paramètres globaux de l'écoulement

Sensibilité à la taille

Dans la table I, on présente l'estimation numérique des paramètres d_i pour des écoulements sans incidence autour d'une parabole de taille respectivement 1, 10, 100 m, à une altitude de 75 Km et pour un nombre de Mach à l'infini amont de 25. Dans la table II, sont représentés, pour les mêmes écoulements, les vecteurs propres associés à chaque valeur propre λ_i.

On peut faire les remarques suivantes:

(i) dans les trois cas, une des valeurs du paramètre d_i est plus petite que l'unité et le mode propre associé à cette valeur semble influencer principalement la fraction massique de l'espèce N. Sur la base de l'analyse faite dans le paragraphe précédent, on s'attend donc, pour les trois écoulements, à une pente verticale de la fraction massique de N et de la température au point d'arrêt. Cette prévision est exactement confirmée par les résultats de la procédure d'intégration numérique (voir paragraphe 4), présentés dans les figures 20-27,

(ii) les valeurs des paramètres d_i semblent être proportionels à la taille de l'obstacle, ce qui confirme l'évolution vers une régularisation de la solution avec l'augmentation de la dimension spatiale et donc du nombre de Damkhöler global du problème. Cette tendance n'est pas surprenante car les valeurs propres λ_i ne dépendent que de la pression au point d'arrêt qui varie peu d'un cas à l'autre (à conditions amont fixées). D'autre part $1/k$ est un temps caractéristique de la convection que l'on peut exprimer comme $1/k = L/v$ où v est une vitesse caractéristique; or celle-ci peut être considérée comme constante lorsqu'on a fixé les conditions amont, V_∞ et la forme de la géometrie en particulier.

Sensibilité au nombre de Mach amont

Dans la table III, on présente l'estimation numérique des paramètres d_i pour des écoulements sans incidence autour d'une parabole de taille 1 m, à une altitude de 75 Km et pour un nombre de Mach à l'infini amont respectivement de 15, 20, 25. Dans la table IV, sont représentés, pour les mêmes écoulements, les vecteurs propres associés à chaque valeur propre λ_i.

En ce qui concerne la sensibilité au nombre de Mach, on peut faire les considérations suivantes:

(i) dans les trois cas, au moins un des paramètres d_i est plus petit que l'unité. Pour l'écoulement à $M_\infty = 25$, le mode propre associé à cette valeur semble influencer seulement l'espèce N: on s'attend donc à une pente verticale de la fraction massique de N et de la température au point d'arrêt. Dans les autres deux cas, on a deux valeurs des paramètres d_i plus petites que l'unité et les modes propres associés semblent influencer toutes les espèces considérées: on s'attend alors à des pentes verticales au point d'arrêt pour toutes les fractions massiques,

(ii) les paramètres d_i augmentent avec M_∞ beaucoup plus vite que linéairement, peut être comme M_∞^4. Aucune interprétation de ce résultat nous est connue.

6 L'APPROCHE NUMERIQUE EN AMONT DU POINT D'ARRET

Sur la base de l'analyse théorique conduite au paragraphe 4, on s'attend à ce que, pour certains écoulements eulériens hors-équilibre, les fractions massiques de certaines espèces et, en conséquence, la température soient continues, mais avec des gradients infinis au point d'arrêt. Une intégration spatiale, pour être précise, nécessiterait donc l'utilisation d'un maillage très raffiné et d'une discrétisation adaptée à une métrique qui varie rapidement. Une telle approche nous est apparue peu pratique.

Comme alternative, on propose de régulariser l'intégration en la paramétrant par le temps lagrangien plutôt que par la variable spatiale eulérienne s (abscisse curviligne).

On réécrit donc les équations stationnaires de convection des espèces, à l'état stationnaire, projetées sur la ligne de courant du point d'arrêt, ce qui donne:

$$\frac{dY_s}{d\tau} = \frac{\Omega(\rho, Y_s, T)}{\rho}$$

où τ est le temps lagrangien, tel que:

$$\frac{ds}{d\tau} = V(s)$$

où s est l'abscisse curviligne ($s = 0$ au point d'arrêt et $s < 0$ en amont).

On rappelle que la température T est liée à la masse volumique ρ et aux fractions massiques Y_s par l'équation de l'énergie (conservation de l'enthalpie totale):

$$H(\rho, Y_s, T) = H_\infty$$

On commence par faire un calcul numérique "standard" de l'écoulement, dont on retient, sur la ligne de courant du point d'arrêt, les valeurs trouvées pour la vitesse, $V(s)$.

Ensuite on modélise la vitesse par une fonction du type:

$$V(s) = \frac{1}{-\frac{1}{ks} + \frac{s}{s1}(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{ks_1})}$$

où V_1 et s_1 sont respectivement la vitesse et l'abscisse (connues par l'intégration numérique "standard") d'un point juste derrière le choc et le paramètre k est obtenu par une procédure d'interpolation des valeurs numériques de la vitesse.

On remarque que la fonction $V(s)$, est équivalente à un profil linéaire dans le voisinage du point d'arrêt $V(s) \sim -ks$ $(s \rightarrow 0)$. Donc, même si les valeurs numériques de la vitesse interpolées ne sont pas correctes, la fonction $V(s)$ a au moins le comportement correct dans le voisinage du point d'arrêt (voir paragraphe 4). Les résultats de cette procédure d'intégration numérique ne donneront donc pas une estimation quantitative exacte, mais plutôt le comportement qualitatif de la solution dans le voisinage du point d'arrêt, ce qui permet de donner un support numérique à l'analyse théorique développée au paragraphe 4.

Par définition même de τ on a alors:

$$\tau(s) = -\frac{1}{k} log\frac{s}{s_1} + \frac{s^2 - s_1^2}{2s_1}(\frac{1}{V_1} + \frac{1}{ks_1})$$

Ensuite on intègre numériquement l'équation de convection de l'espèce s sur un intervalle de temps lagrangien $[0, \mathcal{T}]$ avec $\mathcal{T} \gg 1$, puisqu'on recherche la solution pour $\tau \rightarrow \infty$ (point d'arrêt). On prend $\rho =$ const. à partir du dernier point du maillage eulérien. On obtient ainsi $Y_s = Y_s\ [\ \tau(s)\ ]$ et $T = T\ [\ \tau(s)\ ]$. L'intégration est effectuée par une méthode du second ordre de type Runge Kutta 2.

6.1 Résultats numériques

6.1.1 Un cas représentatif

On présente ici les résultats de l' intégration numérique de l'écoulement autour d'une parabole de 1 m, à 0° d'incidence, pour une altitude de 75 Km et un nombre de Mach à l'infini amont de 25.

Sur la figure 10 on représente les distributions de vitesse le long de la ligne de courant du point d'arrêt obtenues respectivement par l'intégration "standard" et par la modélisation décrite.

Aux figures 11, 12 et 13 on montre les coupes de la fraction massique de N, de la masse volumique et du terme de source de l'équation de convection de l'espèce N, en fonction du temps lagrangien τ. On constate que le dernier point du maillage eulérien correspond à $\tau \approx 3$ (voir coupe de ρ), pour lequel une relaxation complète vers l'équilibre n'a pas encore été accomplie (voir coupe de Y_N), bien que Ω_N soit très petit (de l'ordre de 10^{-2}) et malgré l'utilisation d'un maillage assez fin. En fait la coupe de Y_N est très régulière en fonction de τ, comme on s'attendait. Par contre, si on représente ensuite (figures 14,15,16) les coupes en fonction de s (connaissant $\tau(s)$ par l'intégration "exacte" de l'approximant de $V(s)$) de la température et de la fraction massique de N, on constate que

pour les valeurs de τ supérieures à 3, ce qui correspond sur le maillage eulérien de départ au dernier Δx avant le point d'arrêt, les coupes sont tangentes à l'axe vertical. Le même comportement a été remarqué pour la solution obtenue avec la même procédure sur un maillage extrèmement raffiné près du point d'arrêt (voir figures 17,18,19).

On a donc montré numériquement, pour un cas représentatif des conditions amont de rentrée atmosphérique, que la fraction massique de l'espèce N et la température ont une dérivée infinie au point d'arrêt, d'où l'impossibilité pour les approximations "standard" de calculer la valeur correcte au point d'arrêt sans troncature importante.

6.1.2 Sensibilité aux paramètres globaux de l'écoulement

L'analyse théorique conduite au paragraphe 4 a mis en évidence que le comportement des fractions massiques et, en conséquence, de la température dans le voisinage du point d'arrêt dépend des valeurs de "nombres de Damkhöler" d_i. En particulier, on a montré que certaines des fractions massiques peuvent avoir une pente infinie dans un voisinage en amont du point d'arrêt. Ensuite, l'évaluation numérique des paramètres d_i, pour différentes valeurs des paramètres globaux de l'écoulement, a permis de faire des prévisions sur le comportement de la solution "exacte" pour plusieurs cas représentatifs des conditions de rentrée atmosphérique d'un engin spatial.

On se propose maintenant d'étudier le comportement de la solution obtenue par la procédure d'intégration numérique décrite précédemment, pour les mêmes valeurs des paramètres globaux de l'écoulement, afin de valider numériquement les résultats fournis par la "théorie".

On répète la procédure d'intégration en amont du point d'arrêt pour des écoulements dont on fait varier seulement la taille du corps ou le nombre de Mach à l'infini.

Sensibilité à la taille

D'un point de vue général, on s'attend à ce qu'à mesure que la taille caractéristique de l'obstacle croit, c'est à dire à mesure que le nombre de Damkhöler global de l'écoulement croit, le problème se régularise, car l'écoulement se rapproche globalement de l' équilibre.

Afin d'apprécier quantitativement comment varie la raideur du problème lorsqu'on fait varier les paramètres M_∞ et L, on interrompt l'intégration numéri que aussitôt que la condition $|Y - Y_0| < \varepsilon$ ($\varepsilon = 10^{-2}$) est satisfaite et on note la distance au point d'arrêt DXfin. Bien que cette distance ait une définition

quelque peu arbitraire puisqu'elle dépend fortement de ε, elle donne une mesure de l'ordre de grandeur de l'épaisseur de la "couche limite chimique".

Dans la table V, sont indiquées les valeurs de la quantité DXfin/L, pour des écoulements à une altitude de 75 Km à $M_\infty = 25$, autour d'une parabole de taille respectivement égale à 1, 10, 100 m; la colonne τ montre le temps lagrangien adimensionné correspondant. On observe la très forte dépendance sur la taille L et l'évolution vers une solution régulière quand L croit. Par contre, sur les coupes de Y_N et T le long de la ligne de courant du point d'arrêt (figures 20-27), on observe, même pour des tailles importantes (50 et 100 m), une pente presque verticale au point d'arrêt. Il semble donc que, pour les conditions à l'infini amont étudiées, on ne pourrait obtenir de solutions "régulières" au point d'arrêt que pour des tailles vraiment très élevées, qui ne correspondent pas aux tailles caractéristiques d'engins spatiaux.

Sensibilité au nombre de Mach

Dans la table VI, sont indiquées les valeurs de la quantité DXfin/L permettant d'apprécier l'épaisseur de la "couche limite chimique" pour des écoulements à une altitude de 75 Km, autour d'une parabole de taille 1 m, pour des nombres de Mach à l'infini amont respectivement de 15, 20, 25.

On observe une très forte dépendance sur le nombre de Mach, comme pour la taille. De plus, la valeur estimée de l'épaisseur de la "couche limite chimique" augmente avec le nombre de Mach, bien que le degré de dissociation augmente aussi (Y_{eq} plus élevé).

En conclusion, on remarque que les résultats de la procédure d'intégration numérique, pour différentes valeurs de la taille de l'obstacle et de M_∞, se conforment très bien aux prévisions faites sur la base de l'analyse théorique du paragraphe 5.

7 L'INTEGRATION NUMERIQUE SUR LE CORPS

Dans les paragraphes précédents on a mis en évidence, par une analyse théorique et numérique du comportement de la solution mathématique dans un voisinage en amont du point d'arrêt, pour des écoulements typiques de rentrée atmosphérique, la présence d'une "couche limite chimique", dans laquelle la température et certaines des fractions massiques sont caractérisées par des gradients normaux infinis. Dans les écoulements étudiés, l'épaisseur de cette couche est pratiquement nulle (voir tables V et VI), et donc les méthodes numériques standard ne peuvent pas donner une estimation correcte au point d'arrêt et sur le corps, sans l'emploi de maillages extrèmement raffinés.

Dans cette section, on se propose d'élaborer une procédure simple, qui permette de donner une estimation quantitative correcte de la solution sur le corps, à partir des résultats numériques d'un calcul conventionnel.

Tout d'abord, on peut démontrer à la manière de Prandtl que dans une couche limite, visqueuse ou chimique peu importe, la dérivée normale de la pression est nulle (voir Annexe 1). On peut donc penser qu'un calcul conventionnel qui ignore la présence de la couche limite produit néammoins une distribution correcte de la pression au corps. La première conséquence est que le point d'arrêt est correctement identifié car il correspond au maximum de $p(s)$. De plus, en ce point, les conditions d'équilibre chimique sont réalisées, et donc, toutes les variables chimiques et thermodynamiques peuvent se calculer en fonction de la pression (voir paragraphe 3.2).

Le problème est donc de recalculer les conditions correctes sur le corps, à partir des conditions d'équilibre au point d'arrêt, qui est connu.

7.1 Une première procédure

On a envisagé d'abord de recalculer les fractions massiques et la température le long du corps. Cela par une procédure d'intégration numérique spatiale des équations de convection des espèces, couplées à la relation de conservation de l'enthalpie totale, à partir des conditions connues au point d'arrêt. En effet, si l'on projette les équations de convection des espèces sur le corps, on obtient à l'état stationnaire:

$$\frac{dY}{ds} = \frac{\Omega}{\rho u} \tag{13}$$

où: $Y = (Y_1, Y_2, Y_3)^T$ et $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)^T$,
s est l'abscisse curviligne mesurée à partir du point d'arrêt ($s > 0$ sur le corps),
$\Omega = \Omega(\rho, Y, T)$.

De plus, on rappelle qu'on peut écrire la relation suivante, exprimant la conservation de l'enthalpie totale:

$$\frac{1}{2}u^2 + \sum_{i=1}^{3} Y_i h_i^0 + \sum_{i=1}^{5} Y_i C_{p_i} T + H_{VIB} = H_\infty$$

Pour conduire l'intégration des équations (13) le long du corps on a besoin de connaître la distribution de deux variables en fonction de l'abscisse curviligne. Le choix le plus simple est de retenir du calcul conventionnel la distribution de masse volumique $\rho = \rho(s)$ et de vitesse $u = u(s)$, car elles apparaissent explicitement dans (13). Un tel choix a été adopté, dans le cours de cette étude, mais les résultats obtenus n'ont pas été satisfaisants (voir paragraphe suivant).

On a rappelé précédemment que dans une couche limite, de n'importe quelle nature, la dérivée normale de la pression est nulle et que, donc, un calcul conventionnel fournit la distribution correcte de la pression le long du corps, même s'il ignore la présence de la "couche limite chimique". Donc, un choix sûrement plus rationnel est de considérer $p = p(s)$, connue par un calcul standard.

En ce qui concerne le choix de la deuxième variable, nous ne disposons pas d'un argument qui nous permette de considérer la distribution fournie par un calcul conventionnel comme correcte. On a donc procédé de façon semi-empirique: on a choisi comme deuxième variable le nombre de Mach, car les distributions numériques sur le corps, pour les écoulements étudiés dans ce travail, obtenues, dans un modèle équilibre et hors-équilibre, ne sont pas trop différentes. Ensuite, on a comparé les résultats obtenus avec un tel choix pour le cas test 6.2.3 dans [1] avec les valeurs obtenues par Sabetta (voir [7] et [14]) par une procédure d'intégration globale de l'écoulement par lignes de courant, associée à un raffinement local extrême du maillage lui permettant d'atteindre les conditions d'équilibre au point d'arrêt. Une telle comparaison nous a permis de valider partiellement le choix du nombre de Mach, qui reste cependant, d'un point de vue théorique et physique, complètement arbitraire. Dans la suite, on présentera une extension de la procédure ici décrite, qui permettra de s'affranchir de cette hypothèse arbitraire.

Quel que soit le choix des variables considérées comme connues par le calcul conventionnel, on intègre les équations (13) par la méthode de Runge-Kutta 2 et on résout le système implicite résultant par la méthode de Newton.

On remarque que, si l'on a choisi comme variables connues la pression et le nombre de Mach, on doit à chaque itération de la méthode de Newton exprimer

les variables inconnues qui apparaissent dans (13) en fonction de $p(s)$ et $M(s)$. Pour cela, on a à disposition, en plus de la conservation de l'enthalpie totale, les relations thermodynamiques suivantes:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{i=1}^{5} \frac{Y_i}{m_i}$$

$$M = \frac{u}{a} = \frac{u}{\sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}}}$$

où $\gamma = \gamma(p, H)$.

Il faut donc résoudre, à chaque itération un système supplémentaire d'équations. Cependant, cette procédure est, quel que soit le choix des variables inconnues, très simple et très peu coûteuse en terme de temps de calcul.

7.1.1 Résultats numériques

On présente ici les résultats obtenus par la procédure décrite au paragraphe précédent, dans le cas d'un écoulement autour d'une double ellipse à 30° d'inci dence, à une altitude de 75 m et pour un nombre de Mach à l'infini amont de 25 (voir cas-test 6.2-3 de [1]).

Incidemment, on remarque que l'identification numérique du point d'arrêt pour un cas à incidence n'est pas triviale (il ne coïncide pas forcement avec un point du maillage). Dans cette étude on a employé, pour le calcul de la position sur le corps du point d'arrêt, une procédure d'extrapolation basée sur la valeur de la pression, car le point d'arrêt correspond au maximum de la pression (pour une description détaillée voir Annexe II).

On compare sur la figure 28 les distributions du nombre de Mach sur le corps obtenues respectivement par: le calcul conventionnel □ et la procédure d'intégration dans laquelle on suppose la pression et le nombre de Mach donnés sur le corps (ligne en pointillés). On fait aussi la comparaison avec les résultats obtenus par Fey et al. ◇ (ETH Zentrum) ([7] et [8]), Vos et al. + (EPFL-CERFACS) ([7] et [17]), Borelli et al. × (CIRA-Politecnico di Torino) ([7] et [2]) et Sabetta et al. (ligne continue) (Università di Roma) ([7] et [14]). Les résultats de Sabetta concernent l'écoulement autour d'une simple ellipse de même taille dans les mêmes conditions et peuvent donc être comparés aux autres sur l'intrados et sur l'extrados jusqu'au choc de cabine.

Sur les figures 29 et 30, on fait les mêmes comparaisons pour les distributions sur le corps respectivement de température et de la fraction massique de l'espèce N.

On peut faire les remarques suivantes:

(i) seulement la procédure d'intégration ici élaborée et la méthode Lagrangienne associée à un extrème raffinement local du maillage employée par Sabetta donnent les conditions correctes d'équilibre au point d'arrêt (notamment pour la température et la fraction massique de N). Les écarts observés pour les autres résultats sont, par exemple, de l'ordre de plusieurs milliers de degrés pour la température, ce qui confirme la raideur du problème et la difficulté qui en résulte pour une méthode numérique conventionnelle de calculer les conditions "exactes" au point d'arrêt.

(ii) les résultats obtenus à pression et nombre de Mach donnés sur le corps et par Sabetta se comparent assez bien, ce qui peut donner un support empirique à la validité du choix de ces variables (on rappelle qu'en ce qui concerne le nombre de Mach, aucune explication théorique ne nous est connue). De plus, en ce qui concerne la fraction massique de l'espèce N, on obtient une distribution constante sur le corps, ce qui s'accorde , dans un voisinage aval du point d'arrêt, avec les résultats de la théorie développée au paragraphe 4.

(iii) les résultats obtenus à vitesse et masse volumique données sur le corps, par contre, sont notablement différents des valeurs de Sabetta, surtout en ce qui concerne la distribution de nombre de Mach et de température. De plus, les écarts entre valeurs du nombre de Mach obtenues dans ce cas avec la procédure précédemment décrite et les autres méthodes sont également grands, ce qui nous a amenés à considérer ces résultats comme étant incorrectes.

7.2 Une procédure d'intégration de validité plus générale

Dans le paragraphe précédent on a décrit une procédure numérique très simple, qui permet de recalculer la distribution sur le corps des variables caractérisant l'écoulement, à partir des conditions d'équilibre au point d'arrêt. Pour cela, on a besoin de connaître, sur la base, par exemple, d'un calcul conventionnel, la distribution de deux de ces variables en fonction de l'abscisse curviligne. Or, on dispose d'un argument qui nous permet de croire que la distribution de pression fournie par un calcul standard est "exacte", mais, on ne connait aucune justification théorique pour le choix de la deuxième variable.

On décrit ici une extension de la procédure du paragraphe précédent, qui permet de recalculer toutes les variables sur le corps, en connaissant seulement $p(s)$.

Tout d'abord, on réécrit l'équation stationnaire de bilan de quantité de mouvement en forme non conservative, ce qui donne:

$$\vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \tag{14}$$

On peut facilement montrer que:

$$\vec{v} \cdot \nabla\vec{v} = \nabla(u^2/2) + (\nabla \wedge \vec{v}) \wedge \vec{v} \tag{15}$$

où $u = \| \vec{v} \|$.

Si l'on projette l'équation (14) sur une ligne de courant (en particulier celle du point d'arrêt), en tenant compte de la relation (15), on obtient:

$$\vec{t} \cdot \nabla(v^2/2) + \vec{t} \cdot ((\nabla \wedge \vec{v}) \wedge \vec{v}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p \cdot \vec{t}$$

où $\vec{t}$ est le vecteur tangent à la ligne de courant. On remarque que le vecteur résultant du produit entre parenthèses est normal à la vitesse et donc à la ligne de courant. Finalement, on obtient l'expression suivante:

$$\frac{d(\frac{u^2}{2})}{ds} = -\frac{1}{\rho}\frac{dp}{ds} \tag{16}$$

où s est l'abscisse curviligne.

Ensuite, on intègre numériquement sur la ligne de courant du point d'arrêt l'équation (16) et les équations de bilan des espèces (13) du paragraphe précédent.

De plus, on rappelle qu'on peut écrire la relation suivante, exprimant la conservation de l'enthalpie totale:

$$\frac{1}{2}u^2 + \sum_{i=1}^{3} Y_i h_i^0 + \sum_{i=1}^{5} Y_i C_{p_i} T + H_{VIB} = H_\infty$$

et l'équation d'état:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{i=1}^{5} \frac{Y_i}{m_i}$$

Pour conduire l'intégration des équations (13) et (16) le long du corps, on a donc besoin de connaître la distribution d'une seule variable en fonction de l'abscisse curviligne, à savoir la pression, dont on sait qu'elle est correctement calculée par l'intégration standard.

L'intégration numérique est conduite par une méthode du second ordre de type Runge-Kutta 2 et le système implicite résultant est résolu par la méthode de Newton.

7.2.1 Résultats numériques

On présente ici les résultats obtenus avec la procédure décrite dans le paragraphe précédent pour le même cas test qu'au paragraphe 7.1.1.

On remarque que l'intégration numérique sur l'extrados ne peut être conduite que jusqu'à la cabine: en effet le choc de cabine ne peut pas être capturé, car l'équation (16) n'est pas sous forme conservative. On pourrait contourner ce problème, dans ce cas particulier, en calculant la polaire de choc de cabine, car on connait l'angle de dièdre entre la cabine et le corps. Ensuite, en connaissant donc l'inclinaison du choc, on pourrait calculer les conditions juste derrière le choc, par les relations de Rankine-Hugoniot et enfin reprendre l'intégration numérique à partir de ce point. Pour le moment, on a pas implémenté numériquement cette idée, mais on se propose de le faire dans la suite du travail. Cependant, la comparaison des résultats obtenus jusqu'à la cabine constitue déjà une validation satisfaisante de la procédure.

Sur la figure 31, on compare les distributions du nombre de Mach obtenues sur le corps par l'intégration numérique décrite ci-dessus (ligne continue) et par un calcul conventionnel $\diamond$. Sur les figures 32 et 33, on compare les distributions de la température et de la fraction massique de l'espèce N.

Sur les figures 34, 35, 36, on fait la comparaison entre les valeurs respectivement du nombre de Mach, de la température et de la fraction massique de l'espèce N, obtenues sur le corps par cette dernière procédure et celle décrite au paragraphe (5.1), avec pression et nombre de Mach donnés par un calcul standard.

On peut faire les considérations suivantes:

(i) en ce qui concerne la température et la fraction massique de l'espèce N, on remarque entre la solution standard et celle obtenue par la dernière procédure décrite des écarts considérables, du même ordre que ceux observés sur les figures (29 et 30) (voir point *(i)* du paragraphe (7.1.1)). Par contre pour le nombre de Mach, les deux résultats ne diffèrent pas de manière sensible. Cela peut être considéré comme une confirmation de l'hypothèse avancée au paragraphe (7.1), selon laquelle la distribution du nombre de Mach fournie sur le corps par un calcul conventionnel n'est pas trop différente de la distribution "exacte".

(ii) une nouvelle confirmation de la validité des résultats obtenus avec la première procédure, avec $p(s)$ et $M(s)$ donnés sur le corps, vient de la comparaison entre ces résultats et les valeurs obtenues par la dernière procédure, pour laquelle on est obligé de connaître seulement la distribution de la pression sur le corps. En effet, les résultats sont trés proches.

8 IMPACT

En ce qui concerne la validation des méthodes numériques pour le calcul d'écoule ments eulériens hors-équilibre chimique, cette étude a le mérite d'avoir levé un paradoxe. En effet l'analyse théorique du comportement mathématique de la solution dans un voisinage du point d'arrêt montre que dans certains cas difficiles les fractions massiques sont caractérisées par une pente infinie au point d'arrêt. On ne peut donc ni atteindre la convergence de la solution numérique vers une fonction continue, ni les conditions correctes d'équilibre au point d'arrêt, à moins d'utiliser des maillages indument raffinés. Une méthode numérique conventionnelle pour le calcul d'écoulements eulériens hors-équilibre chimique donne donc des résultats valables en dehors d'une couche très mince autour du corps ("couche limite chimique"). On a montré aussi qu'on peut recalculer les conditions correctes sur le corps, en partant des conditions d'équilibre au point d'arrêt, par une procédure d'intégration numérique très simple.

D'un point de vue physique, la modélisation de l'écoulement par les équations d'Euler n'est pas valable au corps, du fait de la présence de la couche limite visqueuse. L'étude conduite n'est donc pas intéressante pour la prédiction numérique des variables caractérisant l'écoulement au corps, bien qu'elle soit très importante pour la validation des méthodes numériques.

Cependant, cette étude pourrait avoir aussi un impact pour les méthodes qui modélisent l'écoulement par un couplage équations d'Euler - couche limite visqueuse. En effet, le choix des conditions au bord externe et la modélisation des phénomènes chimiques à l'intérieur de la couche limite dépendent très fortement du comportement à la paroi de la solution des équations d'Euler. En effet, si par exemple l'écoulement eulérien est caractérisé par des fractions massiques qui ont des gradients normaux au corps infinis, les conditions au bord de la couche limite visqueuse données par la solution eulérienne à $s = \delta$ sont très différentes des conditions d'équilibre. Donc, quel que soit le degré de catalycité de la paroi, il semble que l'hypothèse d'équilibre chimique dans la couche limite visqueuse soit incorrecte et qu'il vaudrait mieux prendre comme conditions au bord externe de la couche limite visqueuse le résultat d'un calcul eulérien "hors-équilibre". Autrement dit, même si l'on ne s'intéresse pas à la détermination précise de la couche de choc (entre choc et paroi), les résultats obtenus par la résolution numérique d'un écoulement eulérien en équilibre chimique ne sont pas toujours suffisant à fournir les bonnes conditions au bord externe de la couche limite visqueuse.

9 CONCLUSIONS

Dans cette étude, on a présenté une analyse théorique et numérique du comportement à l'état stationnaire des écoulements eulériens hors-équilibre chimique dans un voisinage du point d'arrêt; pour des conditions représentatives de la rentrée atmosphérique d'un engin spatial. Sur la base de cette étude, on peut tirer les conclusions suivantes:

• Au point d'arrêt d'un écoulement eulérien stationnaire "hors-équilibre", des conditions d'équilibre sont localement réalisées.

• Ces conditions d'équilibre, et en particulier la température, sont peu sensibles à la valeur locale de la pression (ou de la masse volumique). Une borne supérieure sur la température s'obtient à partir de l'approximation de couche mince (écoulement newtonien).

• La borne sur la température d'équilibre est bien inférieure à la valeur de la température au point d'arrêt d'un résultat de résolution du modèle hors-équilibre par une méthode numérique typique.

• L'étude théorique développée au paragraphe 2 a montré qu'en ce qui concerne les fractions massiques des espèces, la solution mathématique du problème dans un voisinage du point d'arrêt suit une loi en puissance, dont l'exposant peut se situer entre 0 et 1. Autrement dit, la solution est alors continue mais admet une dérivée infinie, au moins pour certaines fractions massiques et, en conséquence, pour la température. Les méthodes numériques donc ne peuvent pas donner une solution correcte au point d'arrêt à cause de la troncature, sauf emploi de maillages localement extrèmement raffinés.

• On a introduit donc le concept de "couche limite chimique" caracterisée par des gradients très forts de température et de certaines fractions massiques.

• L'estimation numérique de la valeur des exposants de la solution théorique et l'étude de la sensibilité de ces valeurs aux paramètres globaux de l'écoulement (M_∞ et la taille L) ont montré que pour des conditions et des géométries typiques de la rentrée atmosphérique d'un engin spatial, les gradients normaux de la température et de la fraction massique de l'espèce N sont infinis au point d'arrêt.

• On a développé une procédure d'intégration numérique des équations de convection des espèces projetées sur la ligne de courant du point d'arrêt et paramétrées en fonction du temps lagrangien. Cela nous a permis d'obtenir une estimation numérique de l'épaisseur de la "couche limite chimique" et du comportement qualitatif de la solution pour plusieurs valeurs des paramètres M_∞ et L, et en cela d'apporter un support numérique à l'analyse théorique développée.

• Ensuite, on a montré que le gradient normal de pression à travers la "couche limite chimique" est nul, ce qui permet de supposer que la distribution de pression sur le corps fournie par un calcul conventionnel est correcte. En conséquence, on peut identifier correctement la position du point d'arrêt sur le corps, car elle correspond au maximum de la pression.

• On a proposé, vue la raideur du problème pour les écoulements étudiés, deux procédures d'intégration numérique des équations de convection des espèces projetées sur le corps, afin de recalculer correctement les variables caractérisant l'écoulement sur le corps à partir des conditions d'équilibre au point d'arrêt. Dans la première on a besoin de connaître la distribution de deux variables sur le corps (on a choisi le nombre de Mach et la pression), dans la seconde il suffit de connaître $p(s)$. La comparaison des résultats obtenus avec ces deux procédures et les valeurs présentées par plusieurs contribuants dans [1] nous a permis de donner une validation des procédures proposées. En conclusion, on a montré qu'en connaissant la distribution de pression sur le corps, dont la valeur "exacte" est fournie par un code standard, on peut recalculer les conditions de l'écoulement sur le corps par une procédure d'intégration numérique très simple.

• Enfin, on a examiné sommairement ce que peuvent être les conséquences du comportement local de la solution sur le couplage à une procédure de calcul de couche limite.

10 ANNEXE I

On se propose ici de montrer qu'à travers la "couche limite chimique", comme dans celle visqueuse, le gradient normal de pression est négligeable. En effet, si l'on projette l'équation stationnaire de bilan de la quantité de mouvement dans les directions tangente et normale au corps, on obtient, en tenant compte de la conservation de la masse:

$$v_t \frac{\partial v_t}{\partial s} + v_n \frac{\partial v_t}{\partial n} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial s}$$

$$v_t \frac{\partial v_n}{\partial s} + v_n \frac{\partial v_n}{\partial n} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial n}$$

où s, n sont respectivement l'abscisse curviligne sur le corps et dans la direction normale et v_t, v_n sont les composantes de la vitesse sur s et n. On peut faire une estimation a priori de l'ordre de grandeur des termes qui apparaissent dans l'équation précédente. Pour cette estimation on peut utiliser deux longueurs caractéristiques de l'écoulement:

δ l'épaisseur de la couche limite,

l une longueur caractéristique dans la direction de l'écoulement.

On suppose, en outre, que la couche limite est mince et donc telle que $\frac{\delta}{l} \ll 1$. Si U désigne une vitesse longitudinale typique et V une vitesse transversale typique, les gradients $\frac{\partial v_t}{\partial s}$ et $\frac{\partial v_n}{\partial n}$ peuvent être estimés par:

$$\frac{\partial v_s}{\partial s} \sim \frac{U}{l}$$

$$\frac{\partial v_n}{\partial n} \sim \frac{V}{\delta}$$

On peut facilement montrer que ces deux termes doivent être du même ordre, pour que l'équation de continuité soit satisfaite:

$$\frac{V}{\delta} \sim \frac{U}{l}$$

et donc, l'ordre de grandeur de la vitesse transversale est donné par:

$$V \sim U\,\frac{\delta}{l}$$

Les ordres de grandeur de chacun des termes de l'équation de conservation de la quantité de mouvement projetée dans la direction transversale sont alors:

$$v_t \frac{\partial v_n}{\partial s} = U\,\frac{U\delta}{l^2}$$

$$v_n \frac{\partial v_n}{\partial y} \sim (\frac{U\delta}{l})^2 \frac{1}{\delta}$$

Pour que l'équilibre des termes qui composent cette équation puisse être réalisé, le gradient de pression transverse doit avoir comme ordre de grandeur:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial n} \sim U^2 \frac{\delta}{l^2}$$

Alors qu'on peut facilement montrer, par la même analyse, que le gradient de pression longitudinal a comme ordre de grandeur:

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial s} \sim \frac{U^2}{l}$$

On obtient donc que:

$$(\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial n}) \,/\, (\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial s}) \sim \frac{\delta}{l} \ll 1$$

On peut donc conclure que la pression ne varie pratiquement pas dans la direction transversale, et que l'équation de la quantité de mouvement suivant n peut être remplacée par:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0$$

11 ANNEXE II

Pour un écoulement non symétrique, la détermination numérique de la position du point d'arrêt n'est pas triviale: en général il ne coincide pas avec un point du maillage. On décrit ici la procédure d'extrapolation adoptée dans ce travail.

Sur la base d'un calcul conventionel de l'écoulement on identifie le noeud du corps où la pression assume la valeur la plus élevée, car le point d'arrêt correspond au maximum de la pression. Ensuite, le segment du maillage contenant le point d'arrêt est déterminé comme le segment qui unit ce noeud, avec le noeud voisin caractérisé par une vitesse de signe opposé. Le point d'arrêt sera le point de ce segment où la pression est maximum et la vitesse nulle.

On considère donc, une distribution quadratique de pression entre les deux noeuds aux extrémités, indiqués avec les index 0 et 2 (le point d'arrêt est caractérisé par l'index 1):

$$p(s) \;=\; -a(s-s_1)^2 \;+\; b \qquad (a,b>0)$$

Puisque l'on connait la pression aux deux noeuds, on peut écrire:

$$-a\,(s_0-s_1)^2 \;+\; b \;=\; p_0$$

$$-a\,(s_2-s_1)^2 \;+\; b \;=\; p_2$$

On peut donc obtenir, après des simples calculs, les expressions de a et b et de la pression au point d'arrêt $p_1 = b$:

$$a \;=\; \frac{p_2-p_0}{s_2-s_0}\,\frac{1}{2s_1-(s_0+s_2)}$$

$$p_1 \;=\; b \;=\; \theta\, p_0 \;+\; (1-\theta)p_2$$

où

$$\theta \;=\; \frac{1}{1-(\frac{s_1-s_0}{s_2-s_1})^2}$$

On peut donc connaître la pression au point d'arrêt si l'on détermine son abscisse curviligne s_1. Pour cela, il faut identifier le point du segment où la vitesse est nulle. Dans un voisinage du point d'arrêt le profil de vitesse peut être considéré linéaire (voir paragraphe 3 et figure 8) et on peut donc écrire les relations suivantes:

$$\frac{s_1-s_0}{s_2-s_1} \;=\; -\frac{u_0}{u_2}$$

où l'on a supposé $u_0 < 0$ et u_0, u_2 sont connues par un calcul standard.

On peut donc facilement déterminer l'abscisse curviligne et la pression du point d'arrêt, car le paramètre d'extrapolation θ est connu et donné par la relation suivante:

$$\theta = \frac{1}{1 - (u_0/u_2)^2}$$

12 TABLEAUX

Taille	1	10	100
d_1	4.8386	45.351	447.179
d_2	11.348	106.360	1046.202
d_3	0.001	0.014	0.139

TABLE I .

Les paramètres d_i en fonction de la taille

Taille	1	10	100	Espèces
mode propre	-0.441	-0.441	-0.441	O
associé à	0.385	0.385	0.385	N
d_1	0.810	0.810	0.810	NO
mode propre	0.093	0.093	0.091	O
associé à	-0.071	-0.071	-0.070	N
d_2	0.993	0.993	0.993	NO
mode propre	0.028	0.028	0.028	O
associé à	0.998	0.998	0.998	N
d_3	-0.052	-0.052	-0.052	NO

TABLE II

Les modes propres associés aux paramètres d_i en fonction de la taille

Mach	15	20	25
d_1	0.407	0.583	4.8386
d_2	2.802	5.452	11.348
d_3	0.0003	0.0006	0.0015

TABLE III

Les paramètres d_i en fonction de M_∞

Mach	15	20	25	Espèces
mode propre	-0.528	-0.447	-0.442	O
associé à	0.460	0.391	0.385	N
d_1	0.713	0.804	0.810	NO
mode propre	-0.214	-0.002	0.093	O
associé à	0.190	0.007	-0.071	N
d_2	0.958	0.999	0.993	NO
mode propre	0.302	0.061	0.028	O
associé à	0.817	0.992	0.998	N
d_3	-0.490	-0.111	-0.052	NO

TABLE IV

Les modes propres associés aux paramètres d_i en fonction de M_∞

Taille	1	10	100
DX_{fin}/L	10^{-32}	10^{-9}	10^{-3}
τ_{fin}	101.9	29.8	5.87
$Y_{N_{eq}}$	0.43418	0.43415	0.43413

TABLE V

Sensibilité à la taille

Mach	15	20	25
DX_{fin}/L	10^{-283}	10^{-165}	10^{-32}
τ_{fin}	1065.	620.	101.9
$Y_{N_{eq}}$	0.0208	0.1919	0.43418

TABLE VI

Sensibilité au nombre de Mach

12 FIGURES

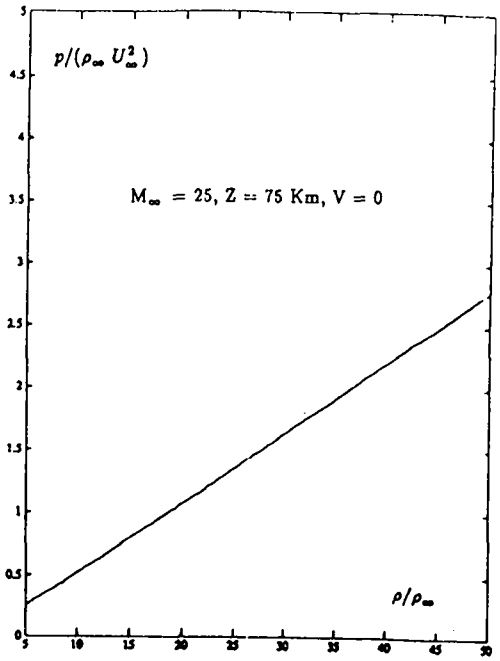


Figure 1: Etat d'équilibre au point d'arrêt. Lien entre la pression et la masse volumique

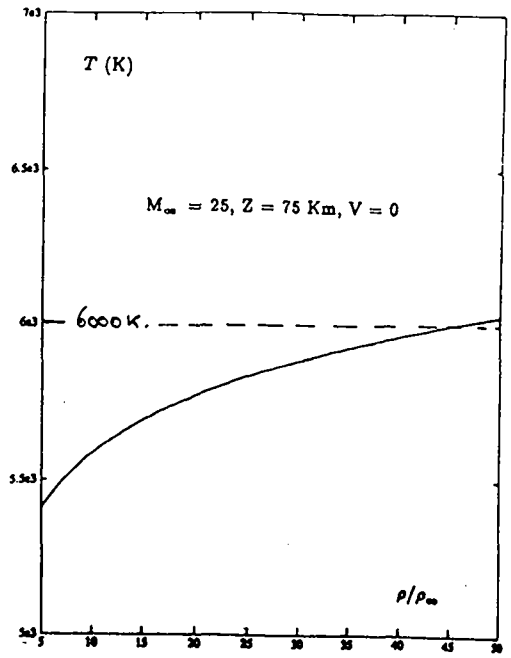


Figure 2: Etat d'équilibre au point d'arrêt. Lien entre la température et la masse volumique

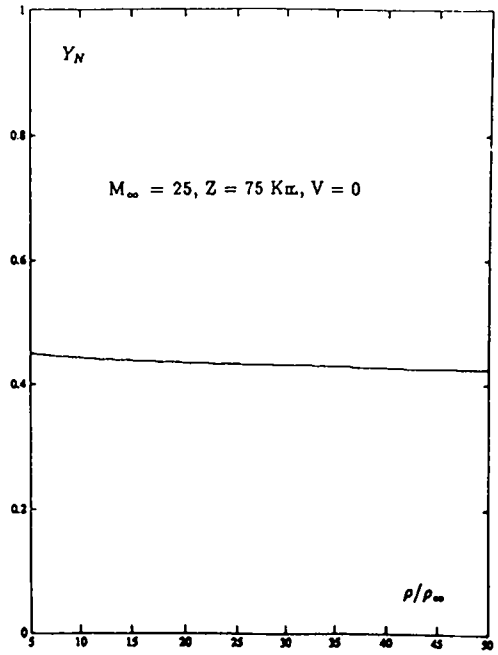


Figure 3: Etat d'équilibre au point d'arrêt. Lien entre la fraction massique de N et la masse volumique

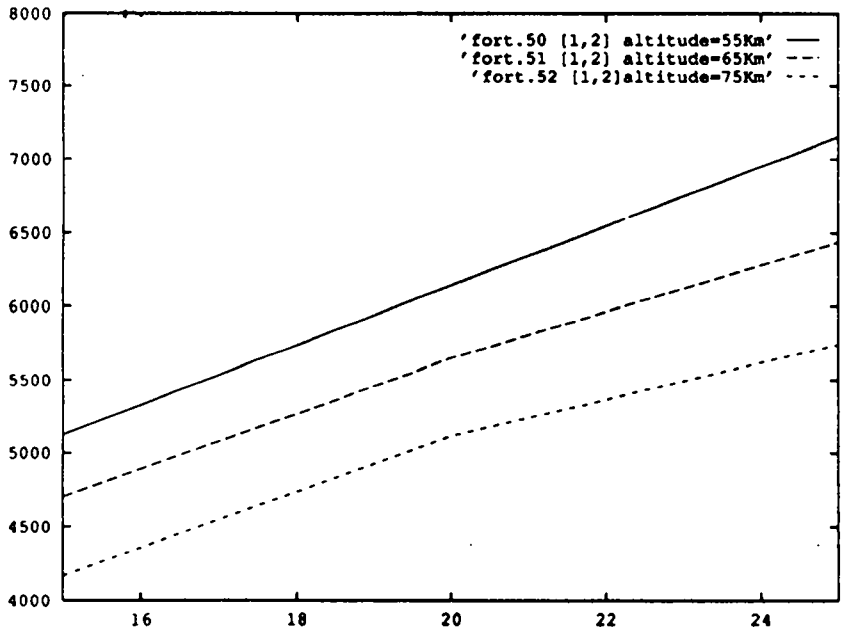


Figure 4: Température au point d'arrêt pour un fluide Newtonien

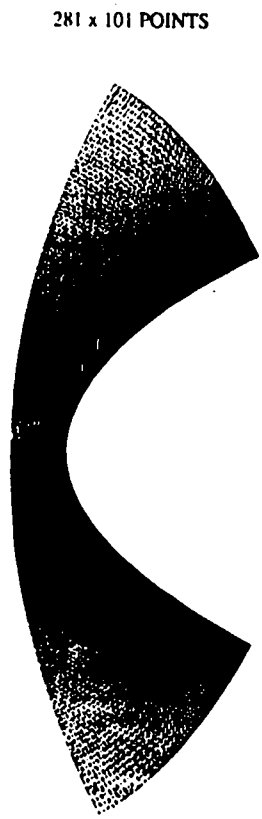


Figure 5: Maillage raffiné autour d'une parabole de 1m (281x101 points)

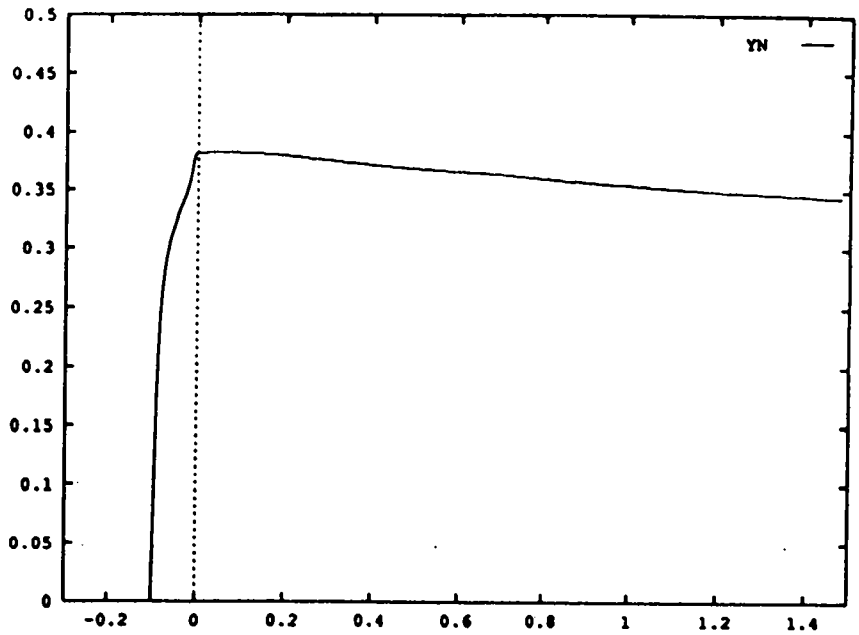


Figure 6: Solution standard sur maillage raffiné. Coupes de fraction massique de N

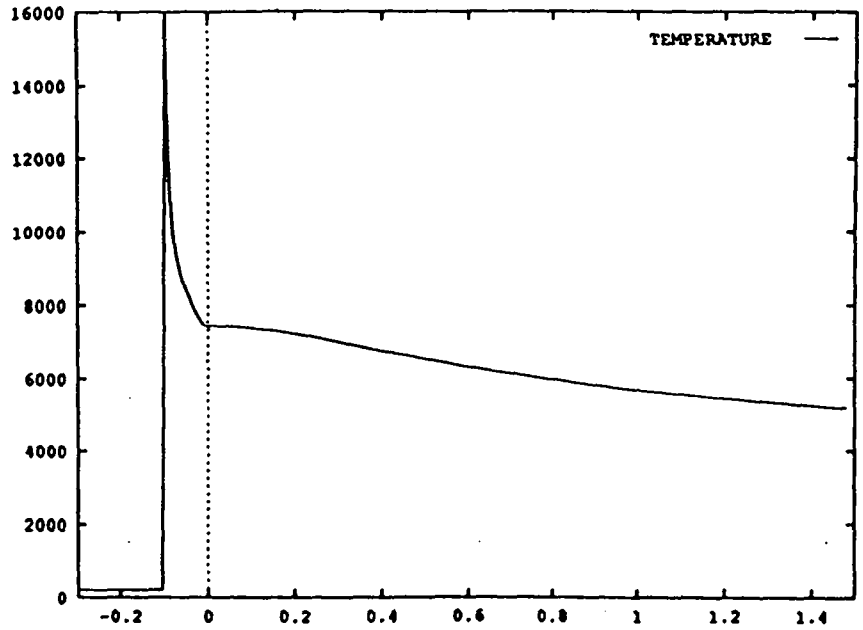


Figure 7: Solution standard sur maillage raffiné. Coupes de température

(a) la configuration

(b) le modèle d'écoulement incompressible

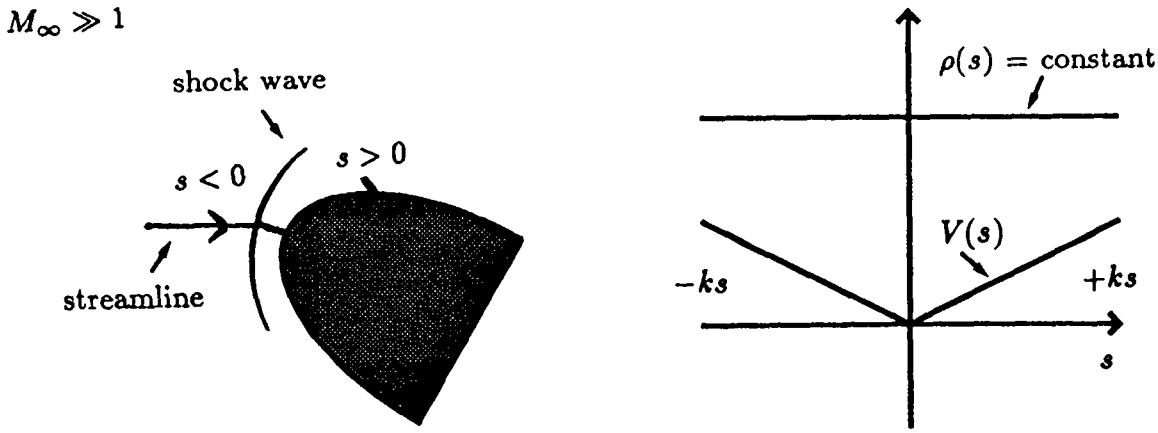
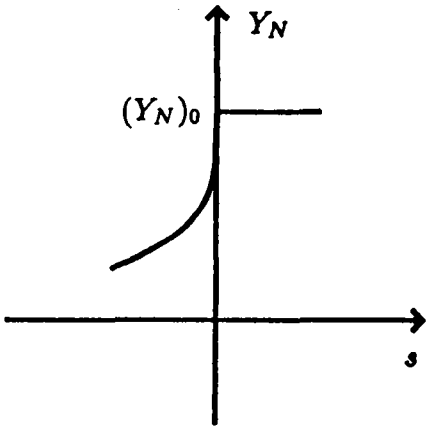


Figure 8: Analyse d'un écoulement eulérien hors-équilibre dans un voisinage du point d'arrêt

(a) une fraction massique



(b) la température

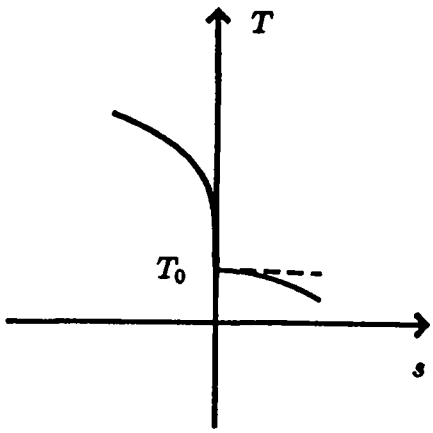


Figure 9: La solution théorique dans un voisinage du point d'arrêt

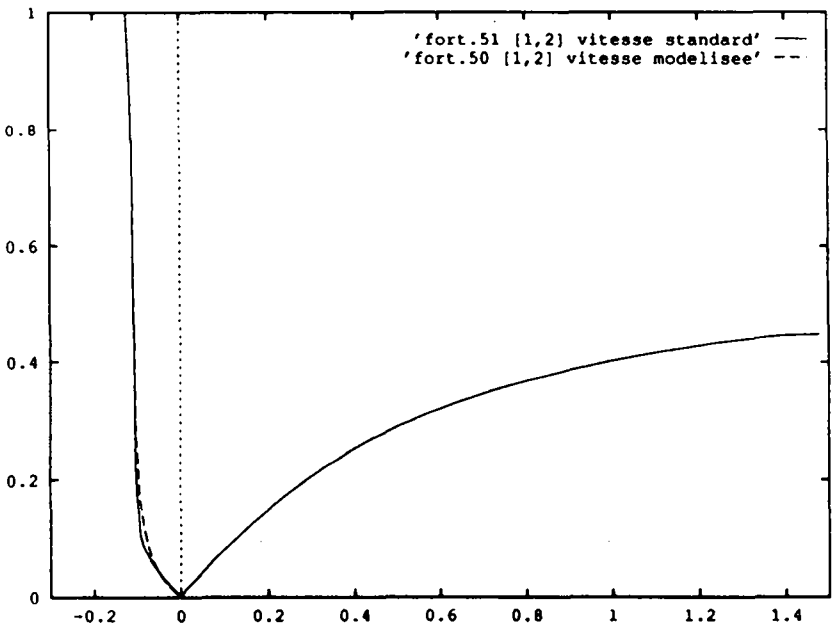


Figure 10: Valeurs numériques et interpolées de la vitesse

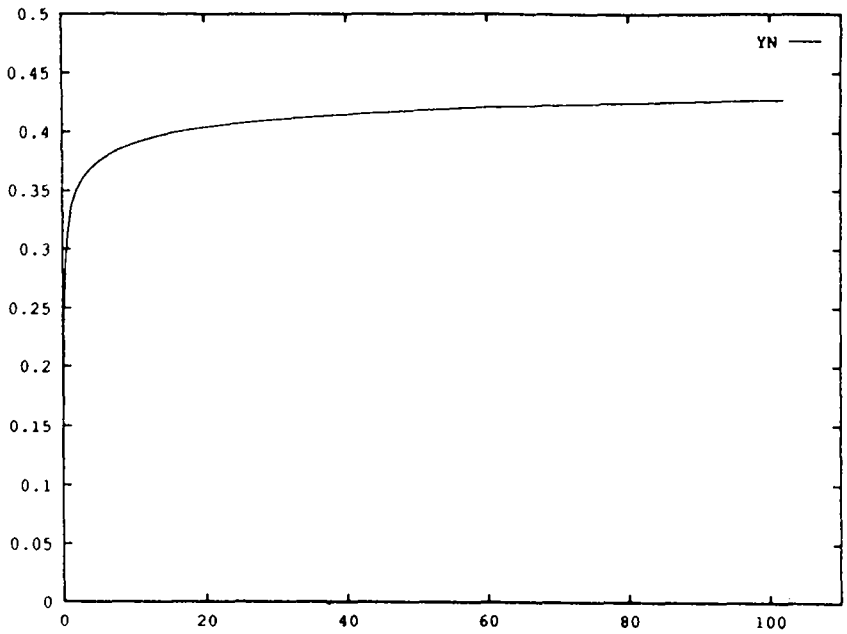


Figure 11: La fraction massique de l'espèce N en fonction du temps Lagrangien

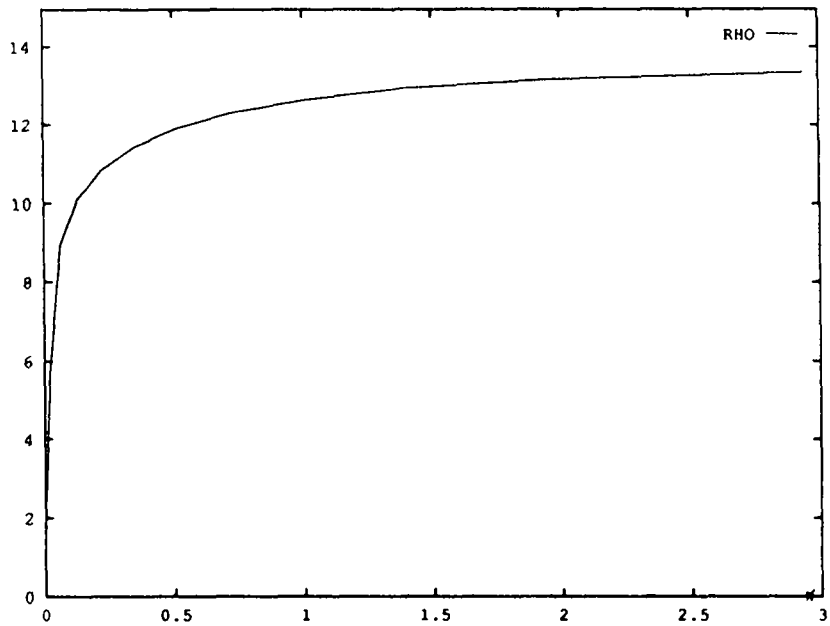


Figure 12: La masse volumique en fonction du temps Lagrangien

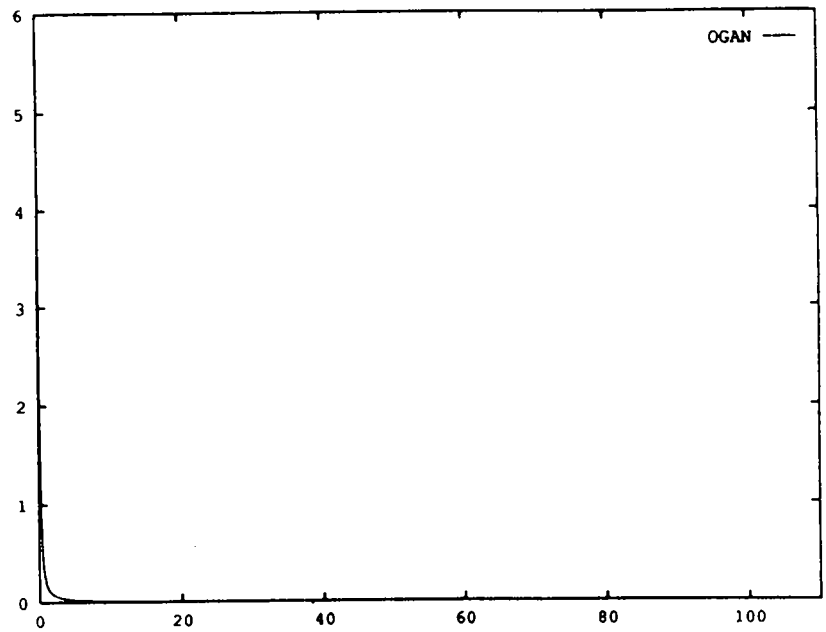


Figure 13: Le taux de production Ω_N en fonction du temps Lagrangien

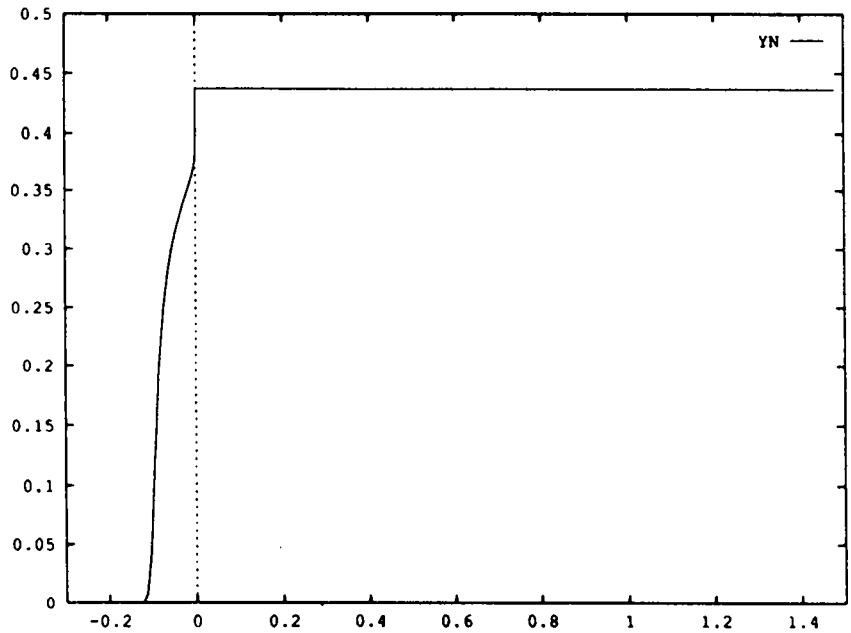


Figure 14: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 93x33 points

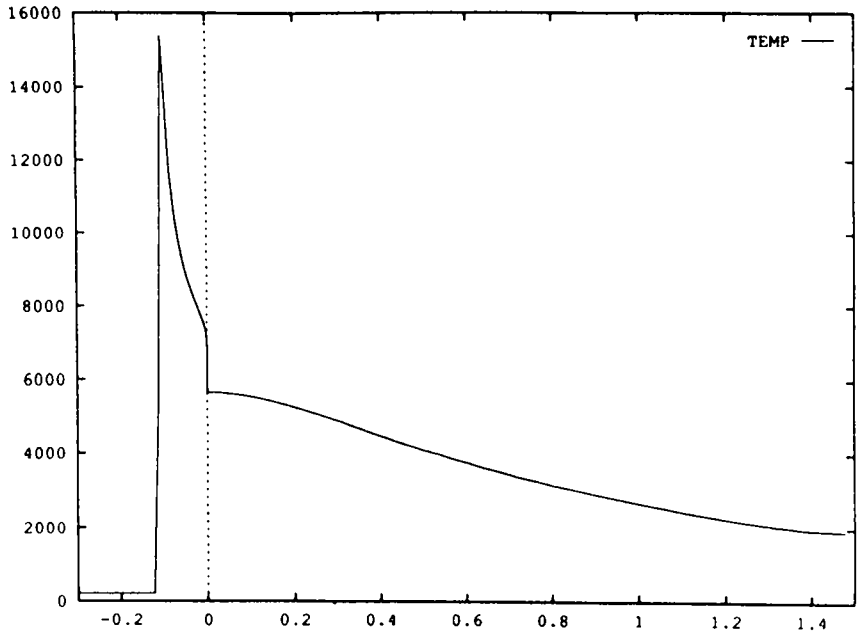


Figure 15: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 93x33 points

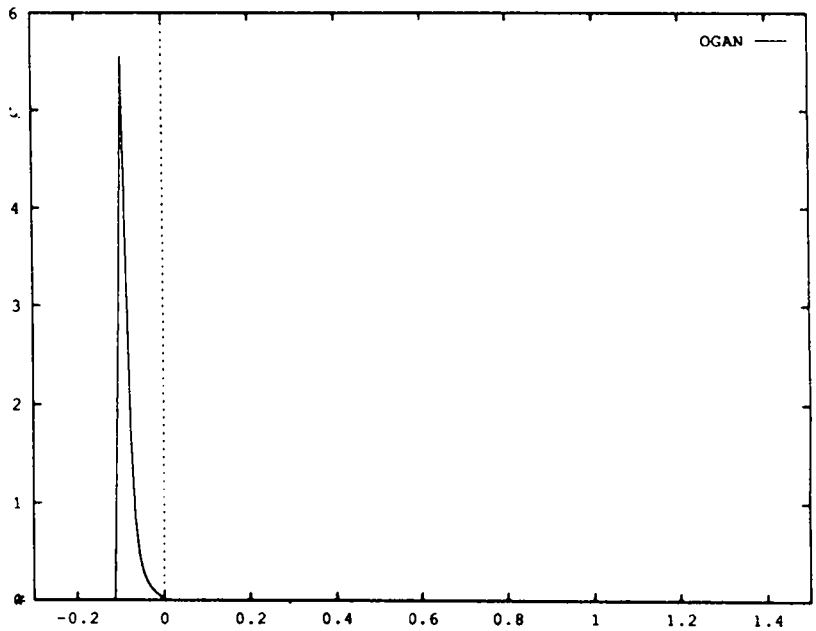


Figure 16: Coupes du taux de production Ω_N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 93x33 points

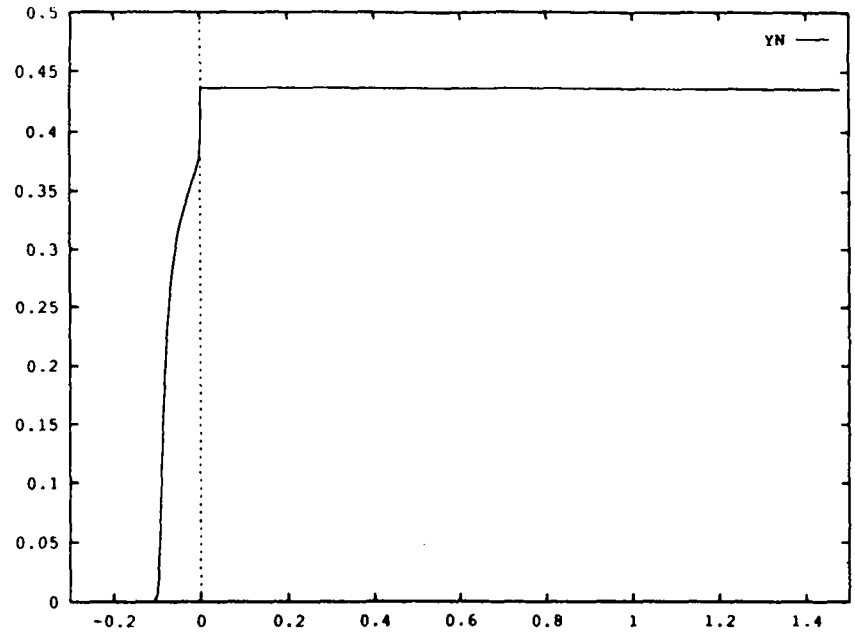


Figure 17: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 281x101 points

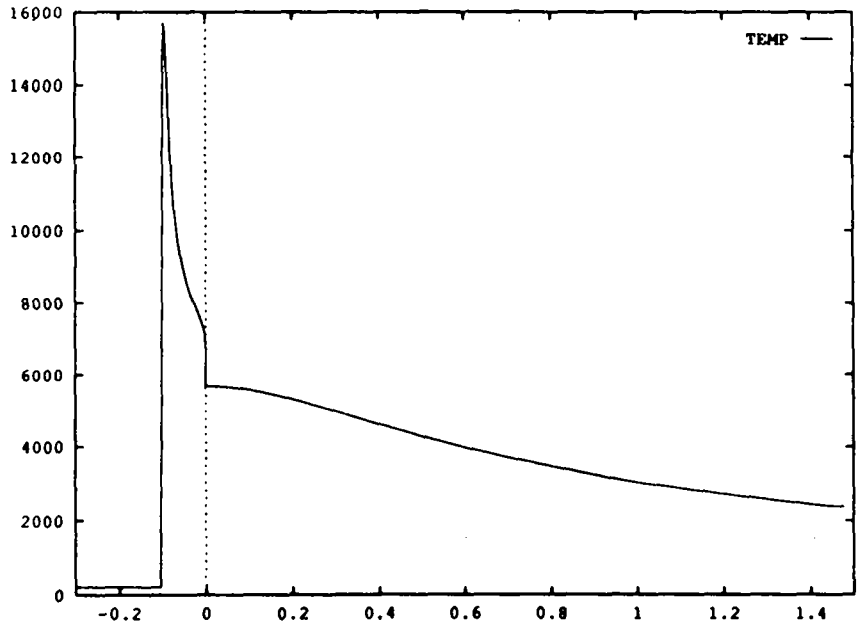


Figure 18: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 281x101 points

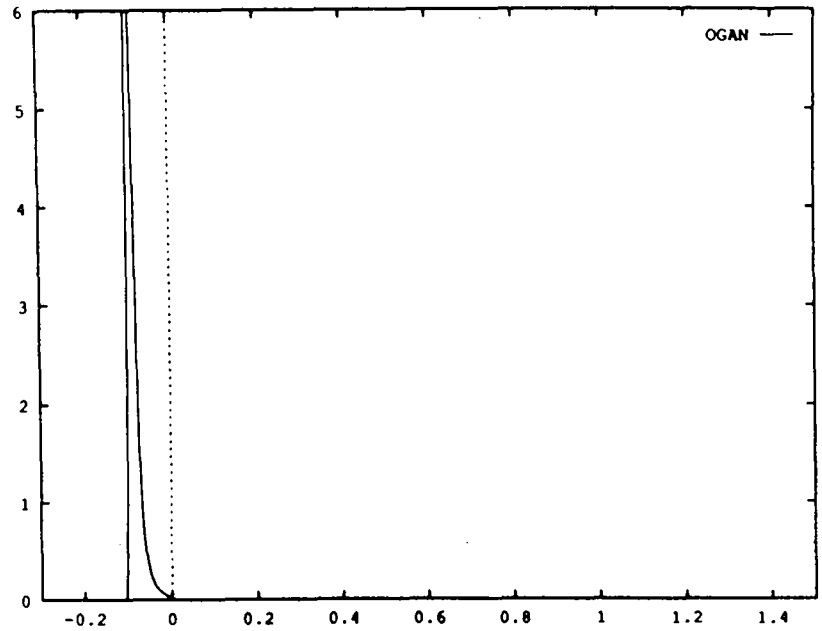


Figure 19: Coupes du taux de production Ω_N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Maillage de 281x101 points

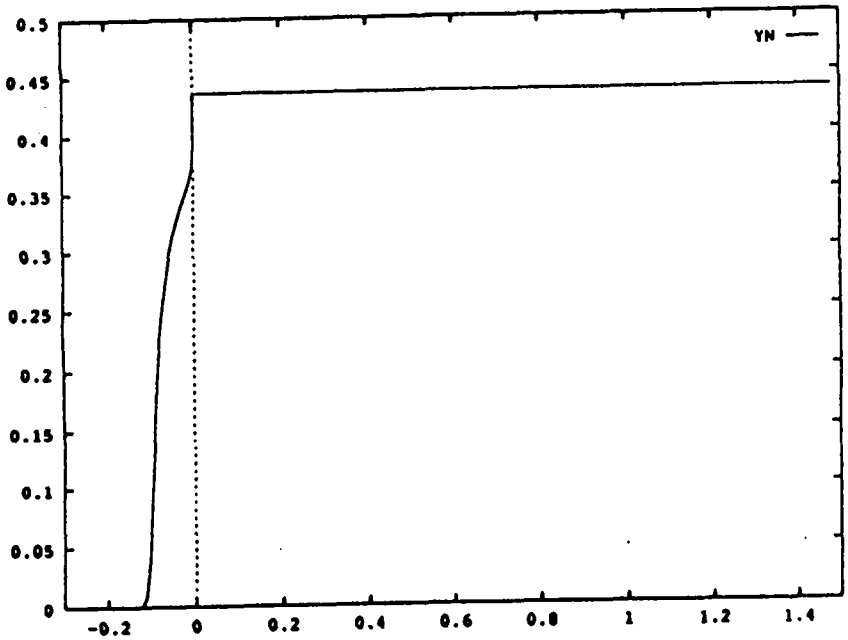


Figure 20: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 1m

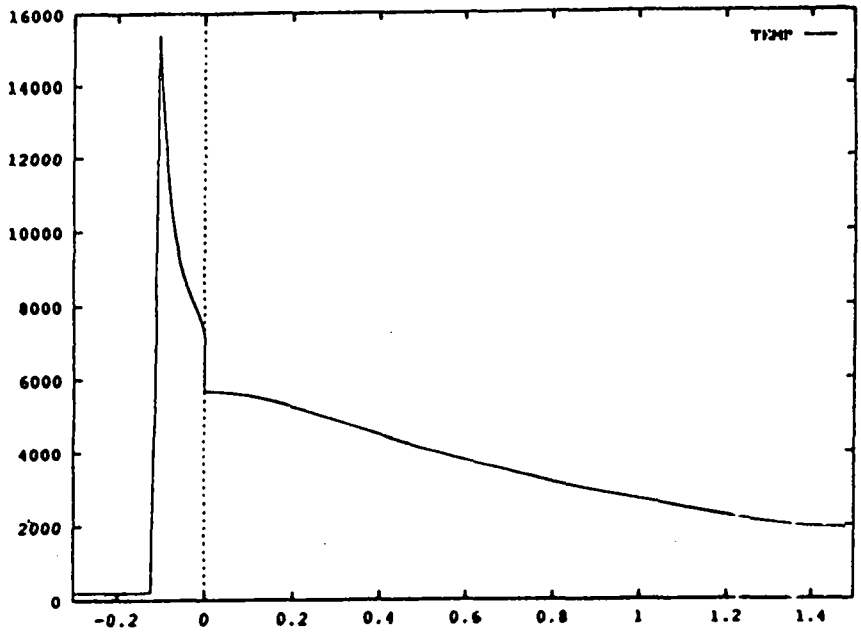


Figure 21: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 1m

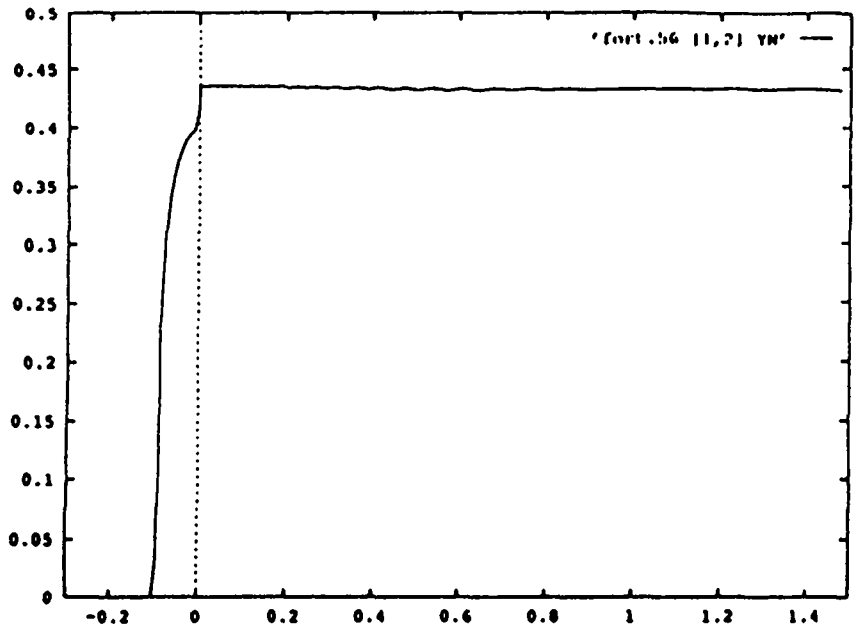


Figure 22: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 10m

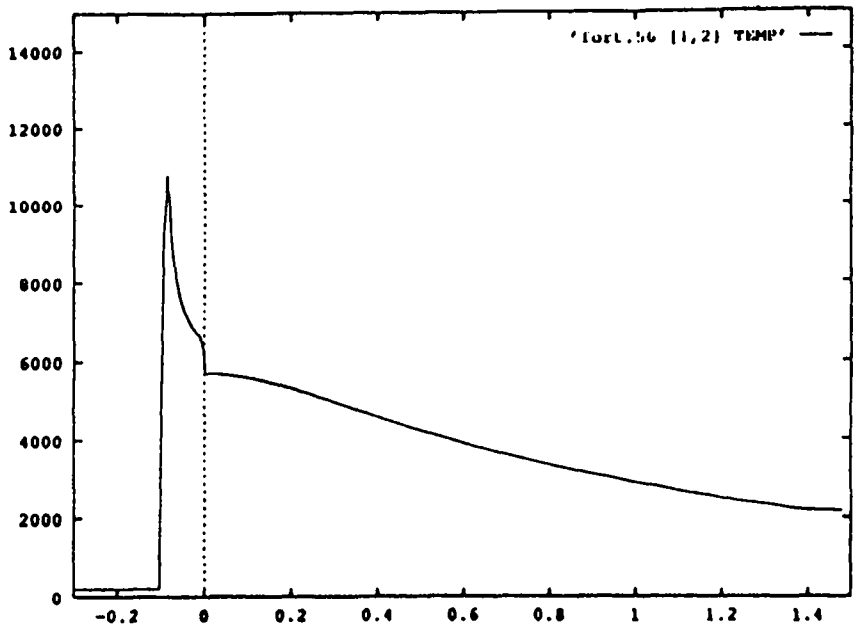


Figure 23: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 10m

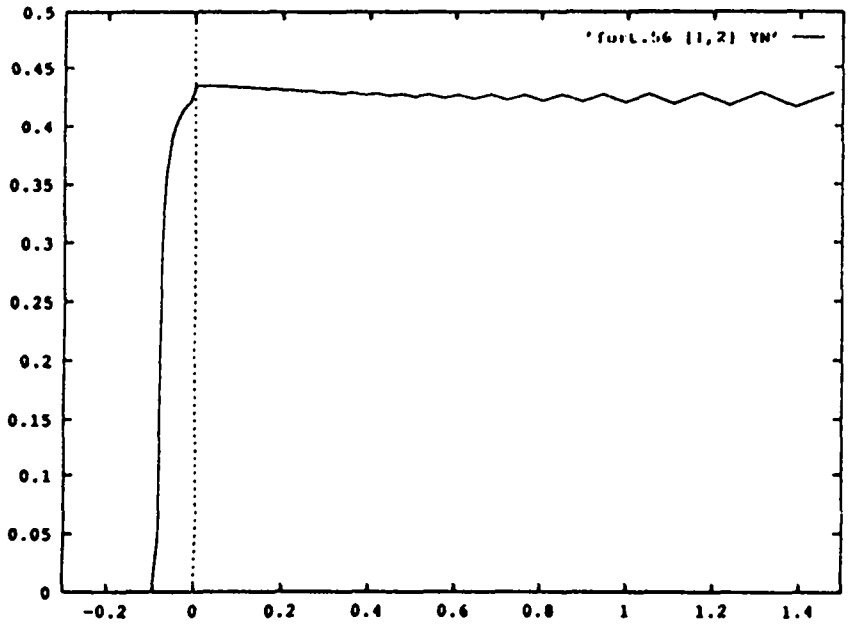


Figure 24: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 50m

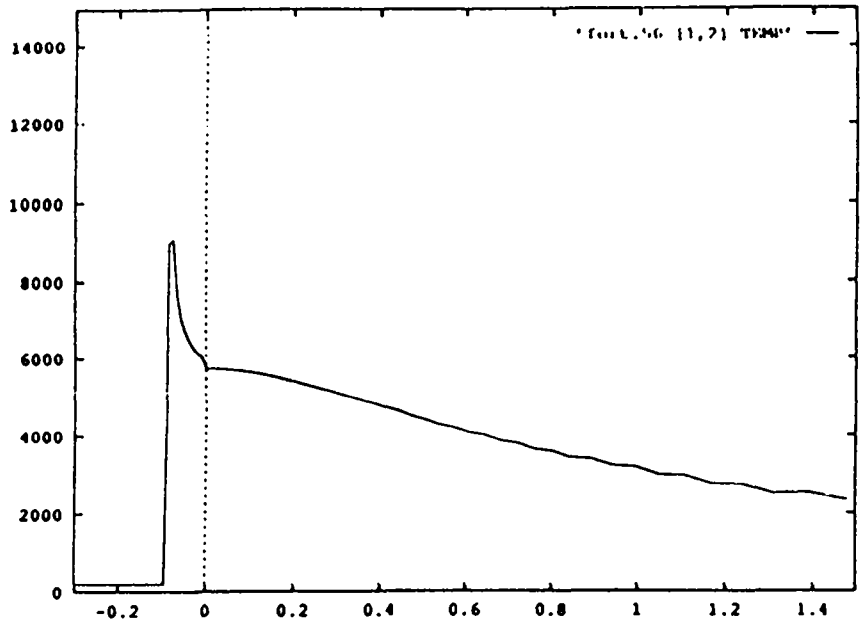


Figure 25: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 50m

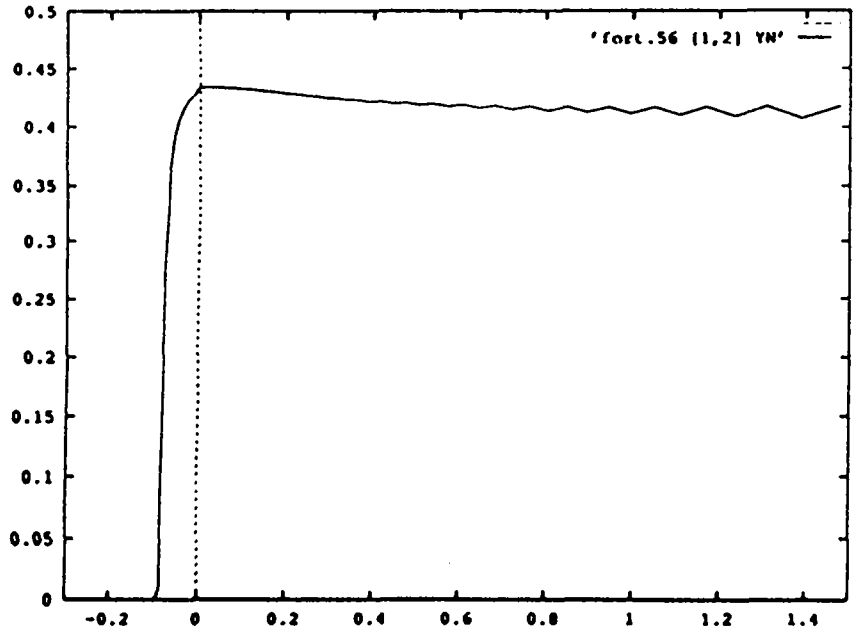


Figure 26: Coupes de la fraction massique de N sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 100m

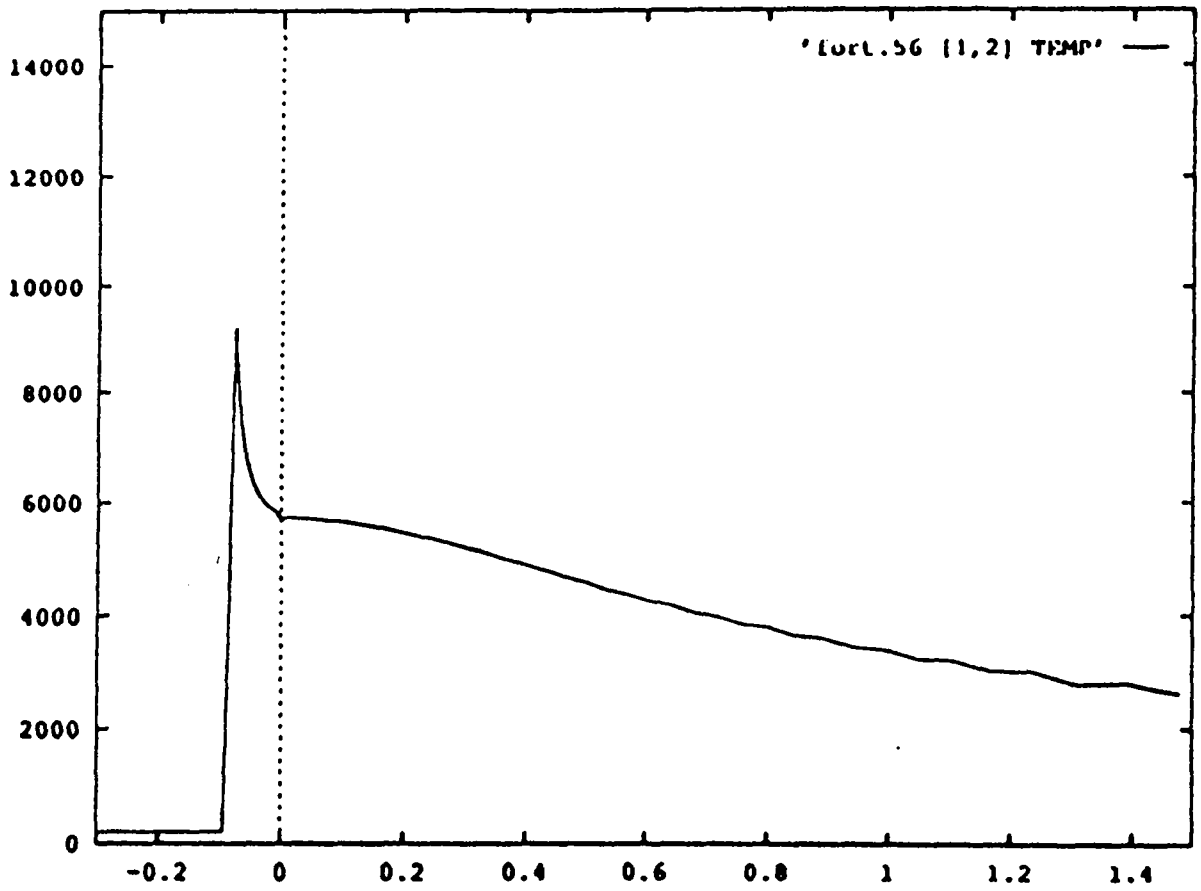


Figure 27: Coupes de température sur la ligne de courant du point d'arrêt. Parabole de 100m

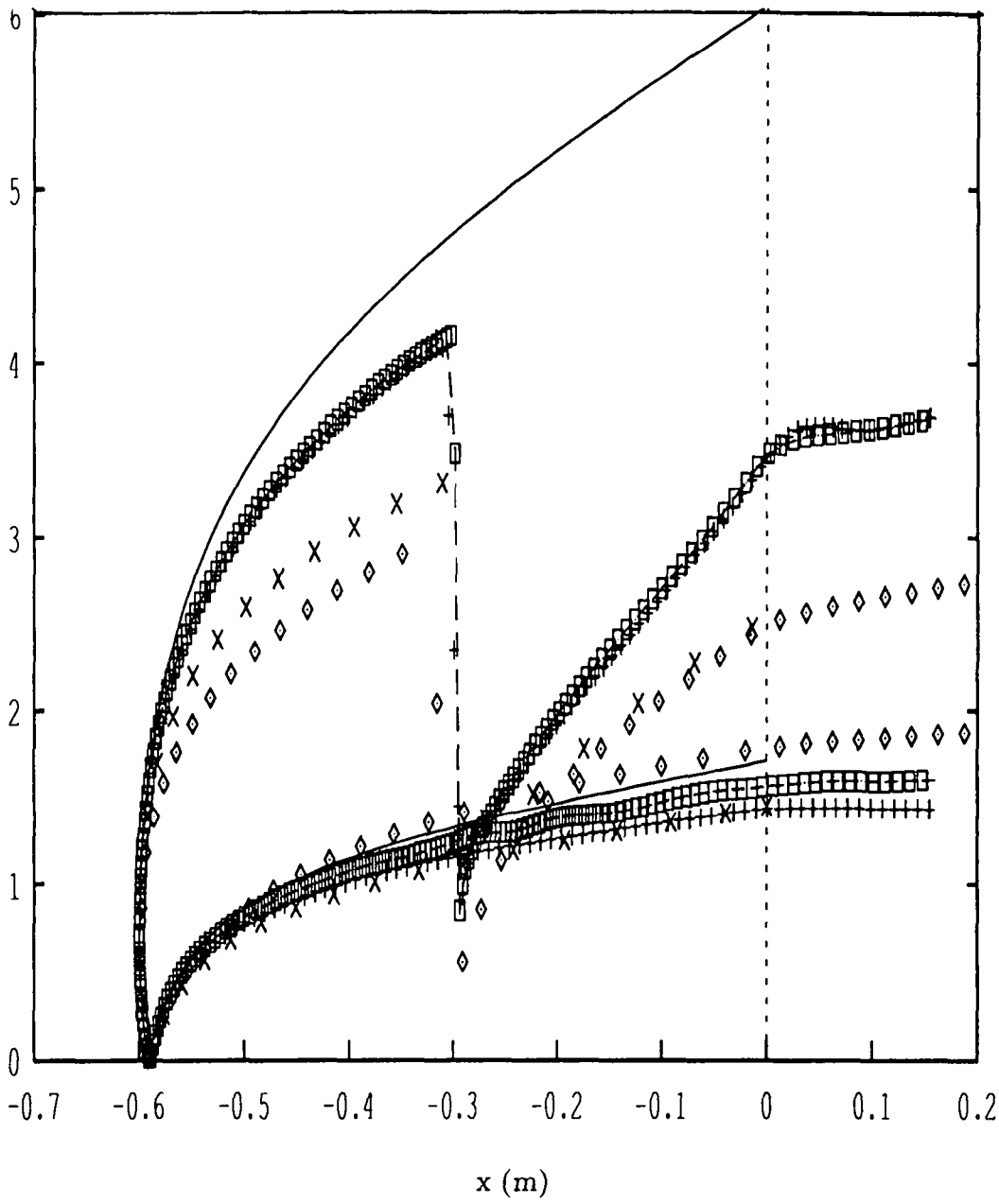


Figure 28: Double ellipse. Distribution de nombre de Mach sur le corps

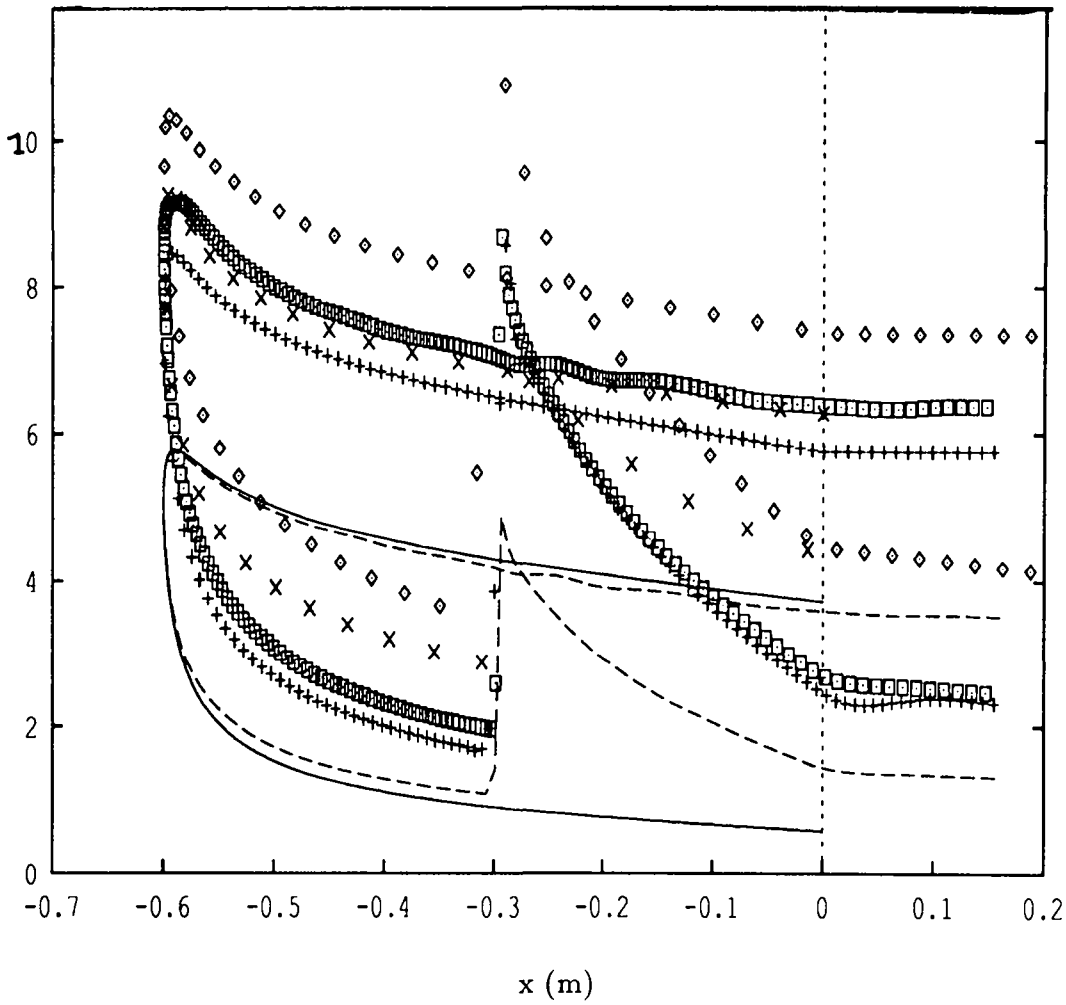


Figure 29: Double ellipse. Distribution de T ($\times$ 1000 K) sur le corps

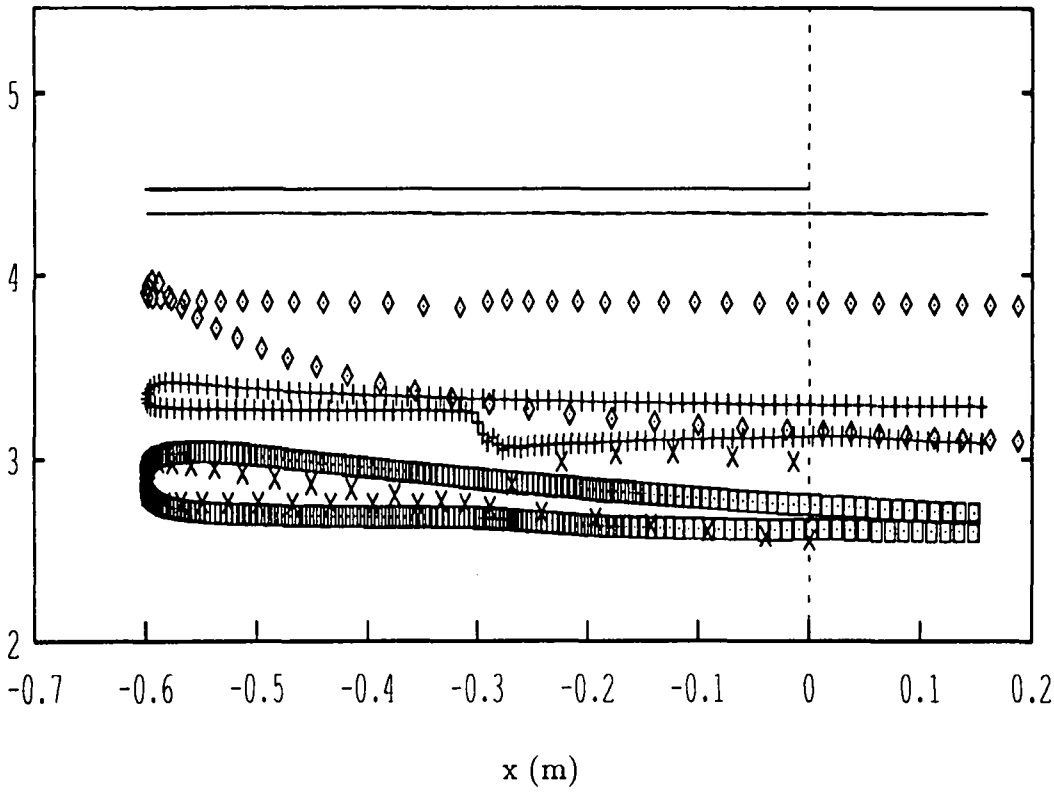


Figure 30: Double ellipse. Distribution de Y_N ($\times$ 0.1) sur le corps

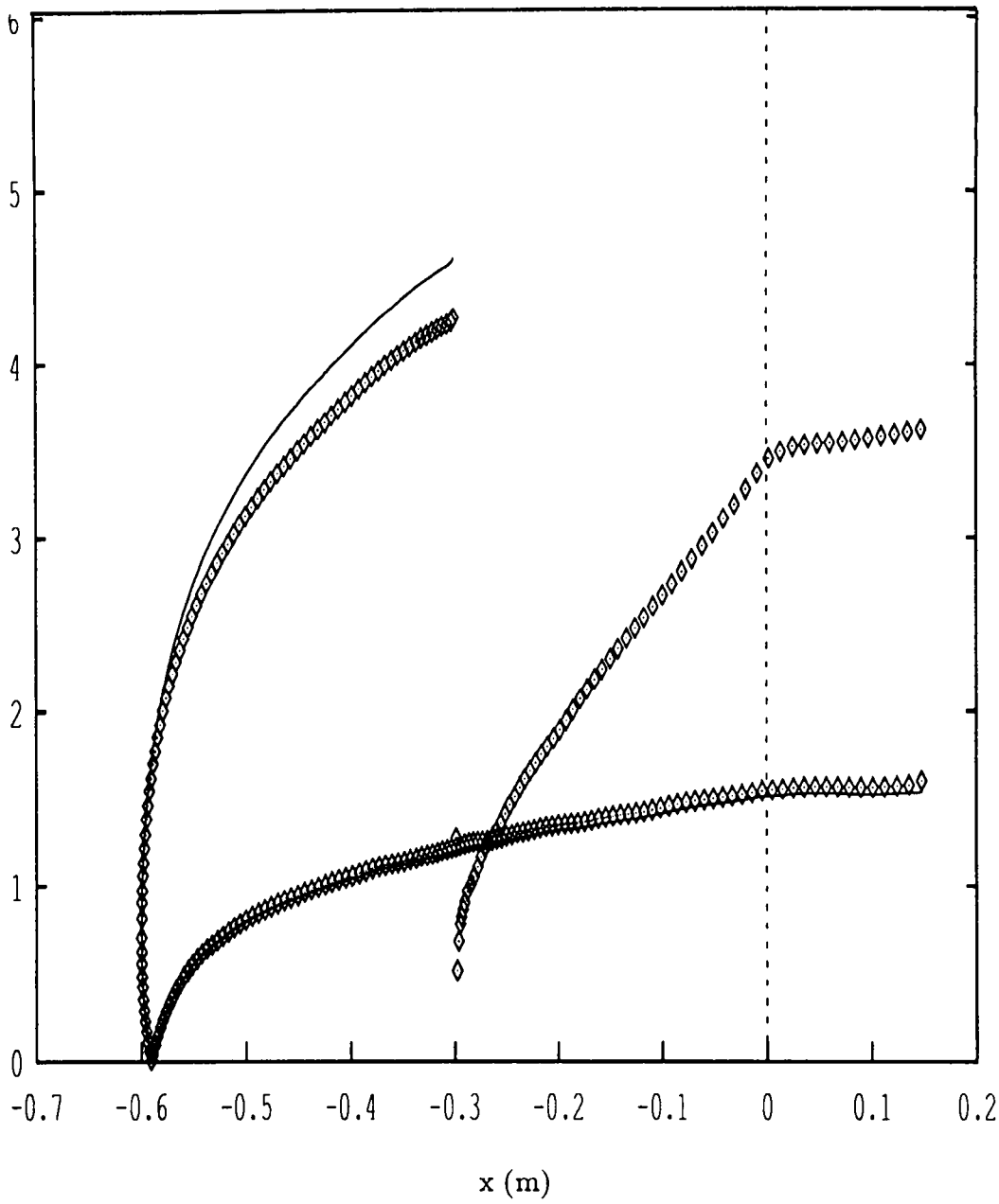


Figure 31: Double ellipse. Distribution de nombre de Mach sur le corps

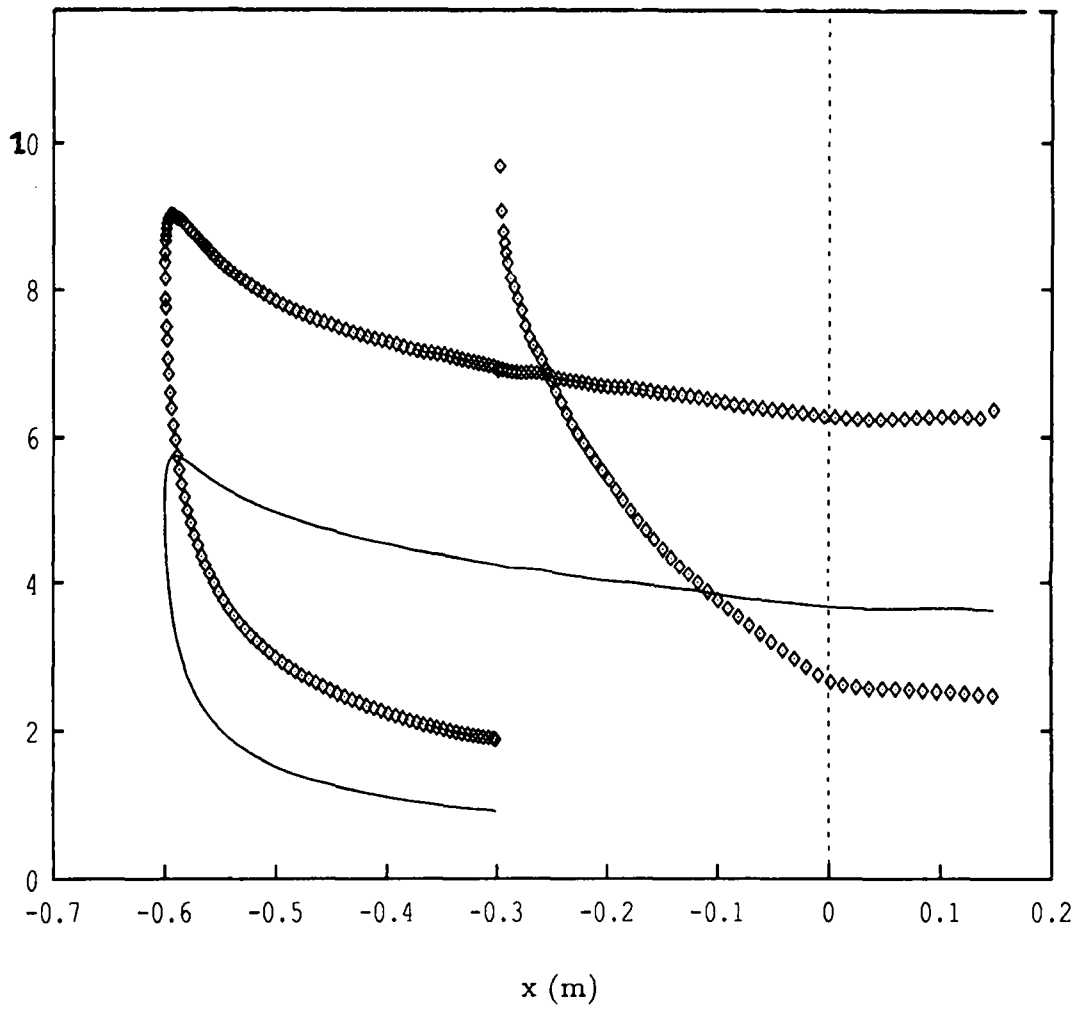


Figure 32: Double ellipse. Distribution de T ($\times$ 1000 K) sur le corps

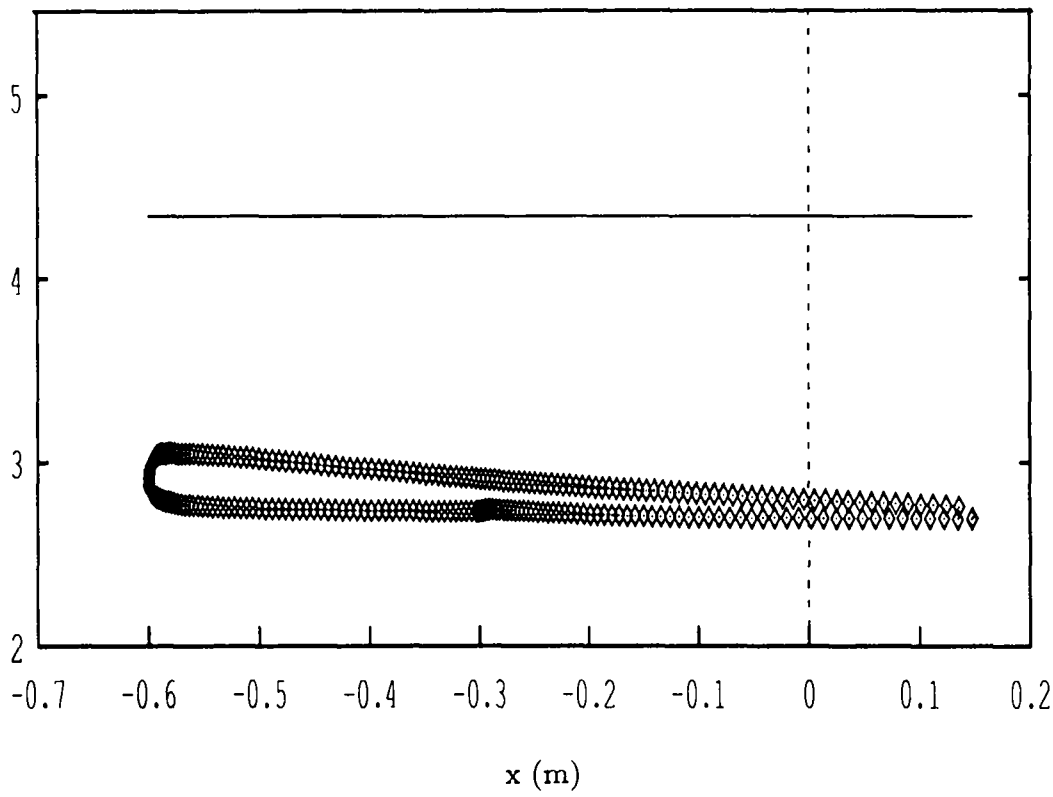


Figure 33: Double ellipse. Distribution de Y_N ($\times$ 0.1) sur le corps

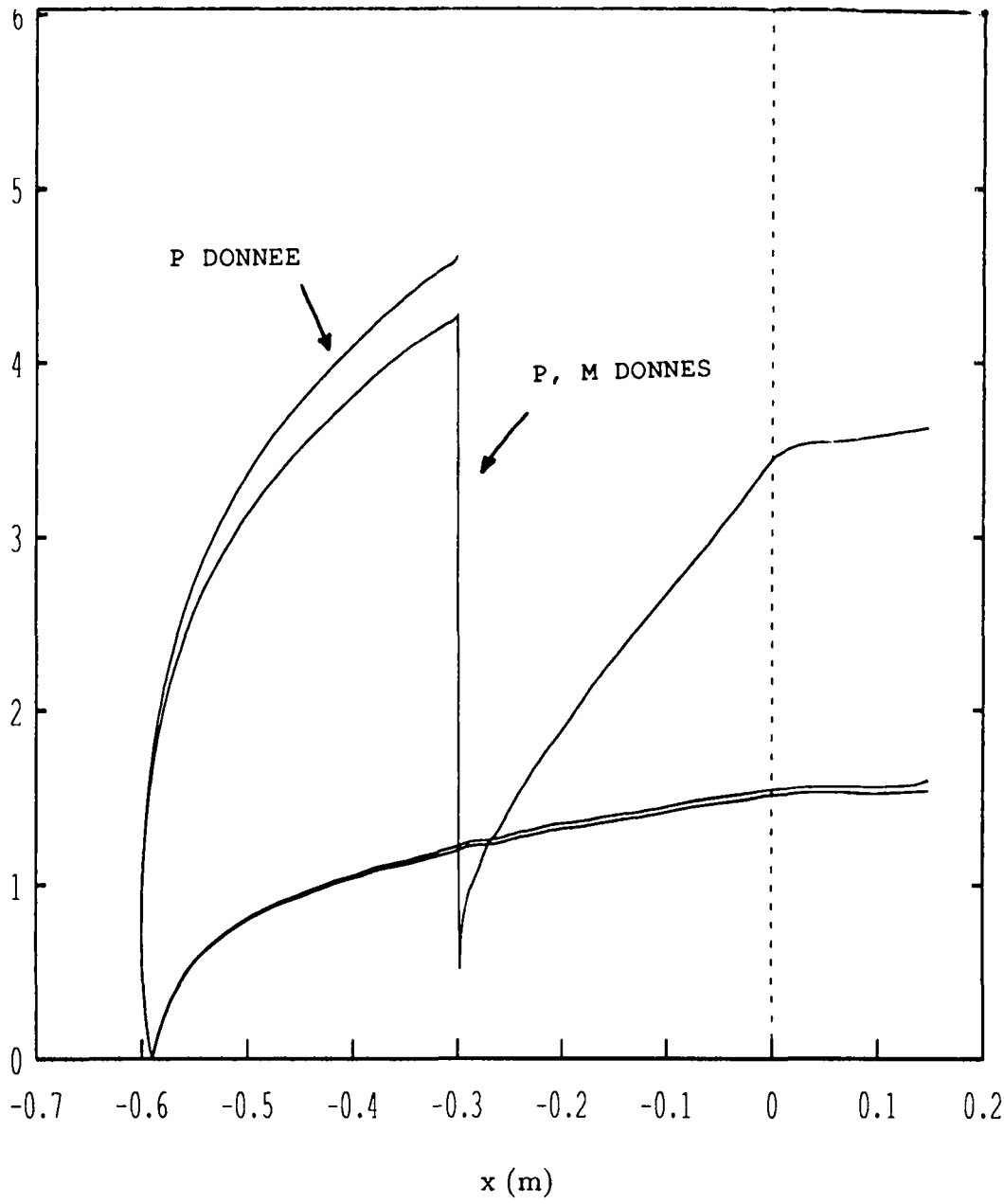


Figure 34: Double ellipse. Distribution de nombre de Mach sur le corps

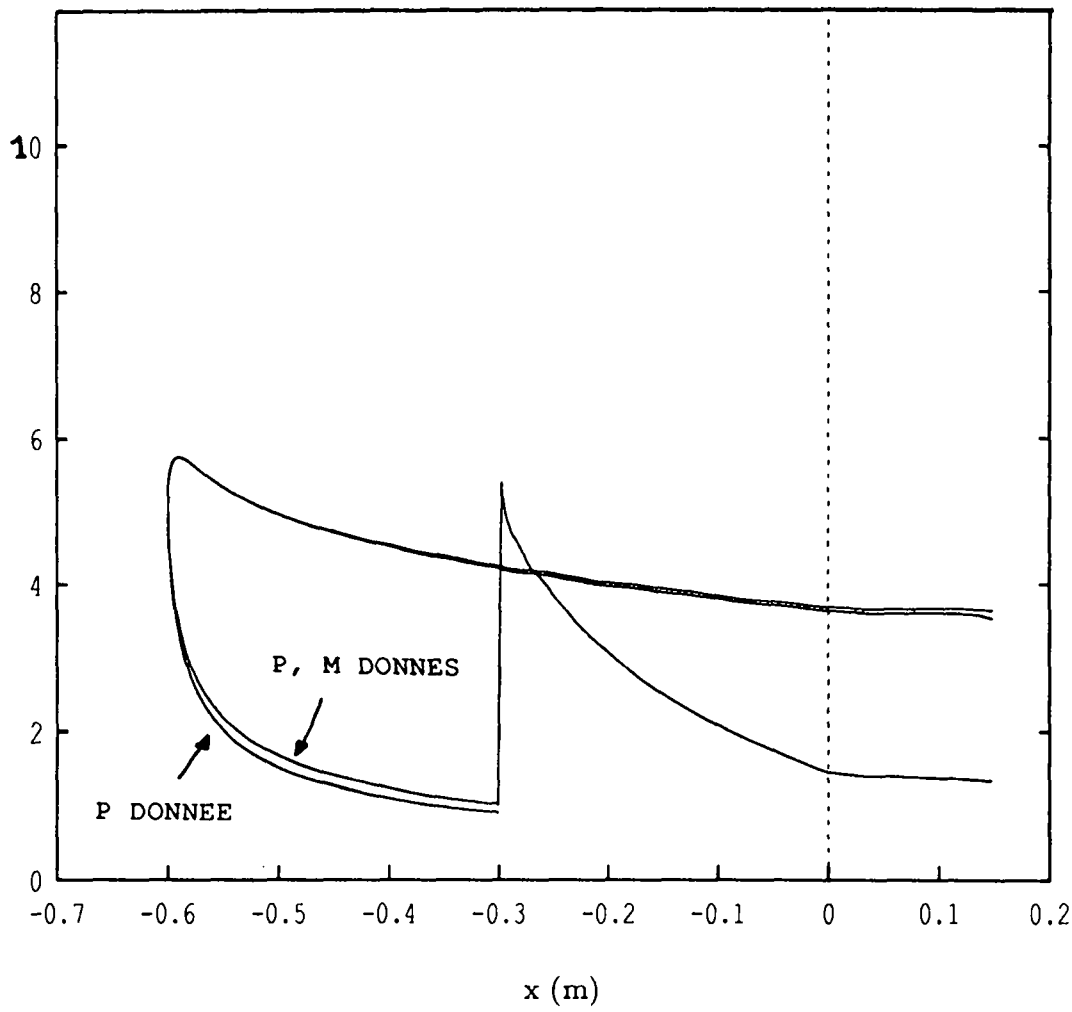


Figure 35: Double ellipse. Distribution de T ($\times$ 1000 K) sur le corps

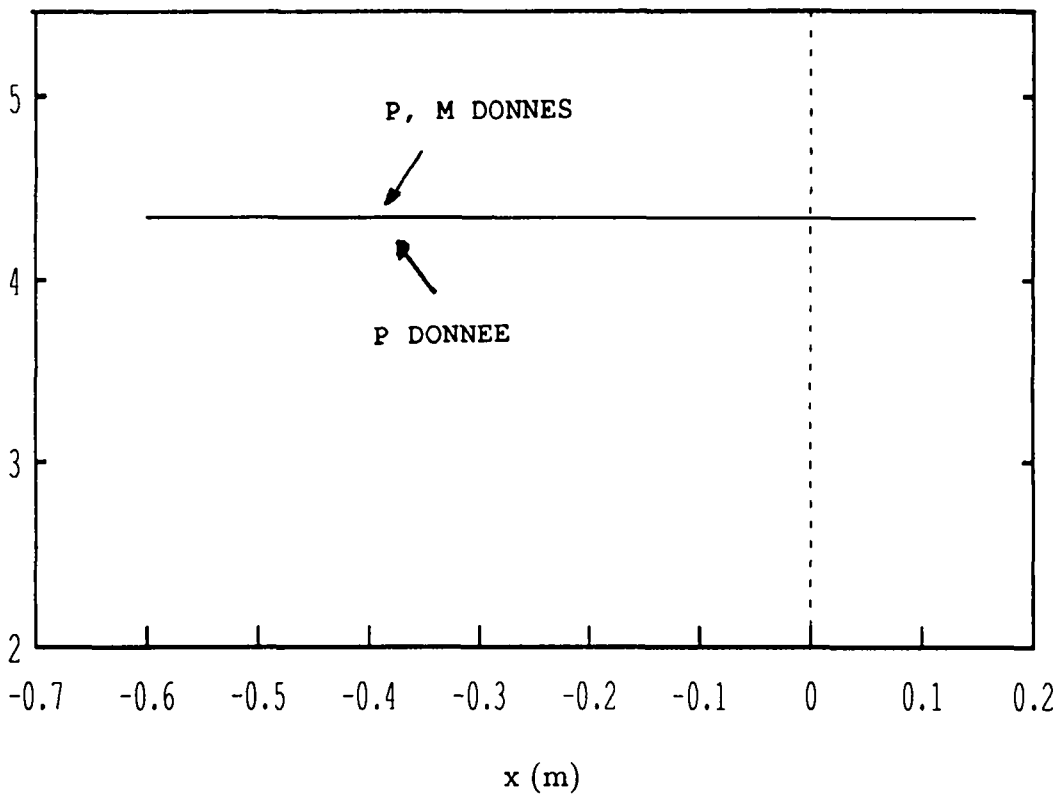


Figure 36: Double ellipse. Distribution de Y_N ($\times$ 0.1) sur le corps

Références

[1] "Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I" *J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., Proceedings of a Workshop held in Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, à paraître*

[2] BORRELLI S., PANDOLFI M. "A contribution to the prediction of hypersonic non-equilibrium flows" *Proceedings of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., 1991.*

[3] BOTTA N.,PANDOLFI M.,GERMANO M. "Nonequilibrium Reacting Hypersonic Flow Around Blunt Bodies: Numerical Prediction" *AIAA Paper 88-0514, AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting, Jan. 11-14, 1988/Reno,Nevada*

[4] 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*

[5] CICCOLI M.C, FEZOUI L., DESIDERI J.A. "Méthodes numériques efficaces pour les écoulements hypersoniques non visqueux hors équilibre chimique" *La Recherche Aerospatiale*

[6] DESIDERI J.A., GLINSKY N., HETTENA E. "Hypersonic Reactive Flows Computation", *Computers and Fluids Journal, vol.18, No.2, pp. 151-182,1990*

[7] DESIDERI J.A. "Some comments on the numerical computations of reacting flows over the double-ellipse (double ellipsoid)" *Proceedings of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., 1991.*

[8] FEY M., JELTSCH R., KARMANN P. "Numerical analysis of chemically reacting inviscid flow in 2-D" *Proceedings of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., 1991.*

[9] GLINSKY N., FEZOUI L., CICCOLI M.C., DESIDERI J.A. "Non-Equilibrium Hypersonic Flow Computations by Implicit Second-Order Upwind Finite-Elements", *Proceedings of the Eighth GAMM-Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics,Edited by P. Wesseling, Notes on Numerical Fluid Mechanics, Volume 29*

[10] PANDOLFI M. Communication privée

[11] PARK C. "On the Convergence of Chemically Reacting Flows", *AIAA Paper 85-0247, AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno/Nevada, January 14-17, 1985*

[12] PARK C. "A Review of Reactions Rates in High Temperature Air" *AIAA Paper 89-1749, 1989*

[13] PARK C. "Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics" *John Wiley and Sons,1990*

[14] SABETTA F., FAVINI B., MORETTI G., ONOFRI M., VALORANI M. "Euler flows about ellipse and double ellipse" *Proceedings of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., 1991.*

[15] SALVETTI M.V., CICCOLI M.C., DESIDERI J.A. "Non-Equilibrium Inviscid avd Viscous Flows over the Double Ellipse by Adaptive Upwind Finite-Elements" *Preprints of Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part II, Antibes, France, April 15-19, 1991*

[16] VINOKUR M. "On Stagnation-Point Conditions in Non-Equilibrium Inviscid Blunt-Body Flows", *J. Fluid Mech. (1970), vol. 43, part 1, pp. 49-75.*

[17] VOS J.B. "Short description of the 2D hypersonic Euler solver including chemistry (6.2.1) (6.2.3) (6.3.1) (6.3.2) (6.3.4)" *Proceedings of the Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part I, Antibes, France, January 22-25, 1990, Springer-Verlag, J.-A. Désidéri, R. Glowinski, J. Periaux Eds., 1991.*

[18] WARNATZ J. "Reacting viscous flow and gas-surface interaction modelling" *Preprints of Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems, Part II, Antibes, France, April 15-19, 1991*

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

Imprimé en France
par
l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique

ISSN 0249-6399