



**HAL**  
open science

# Influence de la modelisation physique des termes visqueux sur le calcul d'écoulements hypersoniques

Maria-Vittoria Salvetti, Massimo Passalacqua

► **To cite this version:**

Maria-Vittoria Salvetti, Massimo Passalacqua. Influence de la modelisation physique des termes visqueux sur le calcul d'écoulements hypersoniques. [Rapport de recherche] RR-1493, INRIA. 1991. inria-00075069

**HAL Id: inria-00075069**

**<https://inria.hal.science/inria-00075069>**

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.

# INRIA

UNITÉ DE RECHERCHE  
INRIA-SOPHIA ANTIPOLIS

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

## Rapports de Recherche

N° 1493

*Programme 6*  
*Calcul Scientifique, Modélisation et*  
*Logiciels numériques*

### **INFLUENCE DE LA MODELISATION PHYSIQUE DES TERMES VISQUEUX SUR LE CALCUL D'ECOULEMENTS HYPERSONIQUES**

**Maria Vittoria SALVETTI**  
**Massimo PASSALACQUA**

Septembre 1991



★ R R - 1 4 9 3 ★

INFLUENCE DE LA MODELISATION  
PHYSIQUE DES TERMES VISQUEUX  
SUR LE CALCUL D' ECOULEMENTS  
HYPERSONIQUES

INFLUENCE OF THE PHYSICAL  
MODELLING OF VISCOUS TERMS ON  
HYPERSONIC FLOW COMPUTATIONS

Maria Vittoria SALVETTI  
INRIA

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

Massimo PASSALACQUA  
Dipartimento di Meccanica e Aeronautica  
Università degli Studi di Roma  
"La Sapienza"  
Italie

# Table des matières

<b>1</b>	<b>RESUME / ABSTRACT</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>ECOULEMENTS VISQUEUX EN DESEQUILIBRE CHIMIQUE</b>	<b>4</b>
3.1	Le problème physique . . . . .	4
3.2	Les hypothèses physiques . . . . .	5
3.3	Les équations . . . . .	5
3.4	Modèle chimique . . . . .	7
<b>4</b>	<b>TERMES DE TRANSPORT</b>	<b>9</b>
4.1	Calcul des termes de transport par la théorie cinétique des gaz .	10
4.2	Modèle proposé par Yos . . . . .	11
4.2.1	Coefficients de viscosité et de conductivité . . . . .	11
4.2.2	Coefficients de diffusion . . . . .	13
4.3	Evaluation des intégrales de collision . . . . .	13
4.4	Description des modèles étudiés . . . . .	13
<b>5</b>	<b>SIMULATION NUMERIQUE D'ECOULEMENTS HYPERSONIQUES</b>	<b>16</b>
5.1	Schéma de discrétisation . . . . .	16
5.2	Conditions aux bords . . . . .	17
5.2.1	La paroi . . . . .	17
5.2.2	Bord entrant . . . . .	17
5.2.3	Bord sortant . . . . .	18
5.3	Tests numériques . . . . .	18
5.3.1	Comparaison des coefficients de transport . . . . .	18
5.3.2	Corps arrondi . . . . .	19
5.3.3	Double ellipse . . . . .	20
<b>6</b>	<b>CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES</b>	<b>23</b>
<b>7</b>	<b>REMERCIEMENTS</b>	<b>25</b>

<b>8</b>	<b>ANNEXE: LOIS DE CONSERVATION</b>	<b>26</b>
8.1	Conservation du nombre d'atomes de $N$ et $0$ . . . . .	26
8.1.1	Écoulements non visqueux . . . . .	26
8.1.2	Écoulements visqueux . . . . .	27
8.2	Conservation de la masse globale . . . . .	28
<b>9</b>	<b>FIGURES</b>	<b>29</b>

# 1 RESUME / ABSTRACT

Dans cette étude on se propose d'analyser quelques aspects de l'influence de la modélisation physique des termes de transport sur le calcul d'écoulements visqueux en déséquilibre chimique. En particulier, ce travail comporte la mise en oeuvre de quatre différents modèles visqueux pour la résolution numérique d'écoulements hypersoniques externes.

Dans une première partie, on présente les équations générales gouvernant l'écoulement d'un mélange gazeux en déséquilibre chimique et le modèle chimique employé.

Dans une seconde partie, on expose en détail le problème de la modélisation des termes de transport par la théorie cinétique des gaz. En particulier, on présente le modèle de Yos [1], dans lequel les coefficients de transport sont calculés à partir de l'hypothèse d'un mélange binaire. En vue des applications numériques, on donne la description de quatre modèles de différentes complexités.

Dans une troisième partie, on présente le schéma de discrétisation employé pour la simulation numérique d'écoulements hypersoniques externes 2D. On analyse enfin, les résultats obtenus avec les différents modèles, pour des géométries de type corps arrondi et double ellipse, dans des conditions voisines de celles de la rentrée atmosphérique d'une navette spatiale.

The aim of this study is to analyse some aspects of the influence of the physical modelling of transport terms on non-equilibrium viscous flow computations. In particular, this work concerns the implementation of four different viscous models, for the numerical solution of external hypersonic flows.

In the first part, we present the general flow equations for a gaseous mixture in chemical non-equilibrium and the employed chemical model.

In the second part, we explain in detail the problem of modelling the transport terms from the kinetic theory of gases. We present specifically the Yos model, in which the transport coefficient calculation is based on the assumption of a binary mixture. With the numerical applications in mind, we give the description of four models of varying complexity.

In the third part, we present the discretization scheme that we have applied to the numerical simulation of two-dimensional external hypersonic flows. Finally we discuss the results obtained with the four models, for the blunt-body and the double-ellipse geometries, in flow conditions similar to the conditions encountered by a space shuttle during the atmospheric reentry.

## 2 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 sous contrat R&D Hermes, et dont le but est la compréhension et la prédiction quantitative de la structure complexe des écoulements hypersoniques autour des corps de rentrée.

Dans ces écoulements hyperenthalpiques à température très élevée, l'air ne peut plus être considéré comme un gaz parfait, mais comme un mélange constitué de différentes espèces chimiques.

Les interactions entre particules et le stockage d'énergie dans leurs modes internes (translation, rotation, excitation électronique, vibration) donnent des effets de gaz réel, comme la dissociation de l'air, la relaxation vibrationnelle et éventuellement l'ionisation.

Tous ces phénomènes chimiques et thermodynamiques changent radicalement le comportement des grandeurs aérothermodynamiques du mélange, ainsi que la charge thermique et aérodynamique des véhicules. A cause de la brutale variation de la température lors de chocs, ou de fortes détente, souvent les processus chimiques et physiques ne sont pas assez rapides devant la vitesse de l'écoulement pour établir localement l'équilibre chimique ou thermique; on parle alors d'écoulements hors équilibre (chimique, thermique, etc.).

Ces écoulements complexes peuvent être calculés par résolution des équations de Navier-Stokes pour un mélange gazeux hors équilibre, qui contiennent, pour chaque variable "hors équilibre" (masse volumique partielle d'une espèce, énergie vibratoire, etc.), une équation de bilan.

Ces équations de bilan font apparaître des termes de flux et des termes de production absents dans le cas d'un gaz parfait, qui doivent être décrit par des modèles physiques complexes, prenant en compte les phénomènes de déséquilibre. En particulier, tous les termes de transport doivent être calculés en incluant les effets des interactions entre les espèces. Par exemple, les coefficients de viscosité et de conductivité thermique du mélange dépendent de toutes les espèces présentes. D'autre part, apparaissent des phénomènes de diffusion qui n'existent pas dans le cas du gaz parfait. La formulation des termes sources dépend aussi des phénomènes de déséquilibre. Pour cette raison, une description microscopique de l'écoulement, comme celle fournie par la théorie cinétique des gaz apparaît nécessaire.

Dans une telle approche, les termes de transport macroscopiques peuvent être calculés par des techniques de résolution des équations de Boltzmann, comme par exemple celle de Chapman- Enskog [2]. Les expressions ainsi obtenues sont

très compliquées à calculer pour un mélange de plusieurs espèces (le calcul implique l'inversion de matrices complexes).

Ce problème rend les modèles dérivés rigoureusement de la théorie cinétique pratiquement inutilisables dans la résolution numérique des écoulements hypersoniques. Les modèles couramment employés sont, pour la plupart, des extensions au cas de plusieurs espèces des résultats de Chapman-Enskog pour un mélange binaire, ou des interpolations de données par des formules semi-empiriques.

Dans ce travail on a étudié quatre modélisations différentes.

Les deux premières, faisant référence au modèle proposé par Yos [1], emploient des différentes techniques d'évaluation des intégrales de collision, alors que le troisième utilise les formules semi-empiriques proposées par Wilke [3]. Le dernier modèle emploie une loi de Sutherland pour la viscosité du mélange et suppose les nombres de Prandtl et de Lewis constants.

Ces modèles ont été implémentés dans un schéma de résolution numérique de type Elements Finis-Volumes Finis pour des écoulements hypersoniques visqueux externes [4]-[5].

En particulier, on a étudié l'influence de la modélisation pour des géométries de type corps arrondi et double ellipse, dans des conditions voisines de celles de la rentrée atmosphérique d'une navette spatiale.

Une attention particulière a été réservée à l'évaluation de la charge thermique et de la friction sur le corps.

Les résultats de cette étude sont présentés et commentés.

## 3 ECOULEMENTS VISQUEUX EN DESEQUILIBRE CHIMIQUE

### 3.1 Le problème physique

Les propriétés macroscopiques d'un mélange gazeux dépendent de la distribution d'énergie parmi les particules. Une molécule peut stocker de l'énergie de plusieurs manières: la première, qui est appelée *énergie de translation*, correspond à l'énergie cinétique d'agitation thermique due au mouvement Brownien de la particule autour de son mouvement moyen. Le deuxième mode de stockage est lié à l'*énergie de rotation* de la particule autour de son centre de masse. Les autres sont responsables, pour des molécules polyatomiques, du stockage de l'*énergie de vibration et d'excitation électronique*. Quand l'énergie de vibration est très élevée, les deux atomes de la molécule se séparent et il y a *dissociation*. Quand l'énergie d'excitation électronique est assez élevée, les électrons peuvent se libérer de la molécule et il y a *ionisation*.

La rotation, la vibration et l'excitation électronique donnent l'*énergie interne* de la particule.

Les différentes énergies s'homogénéisent par les échanges lors des collisions entre les molécules.

En général, la répartition d'énergie de translation, rotation et d'excitation électronique n'ont besoin que de quelques collisions pour s'équilibrer.

On peut alors leur associer une unique grandeur thermique égale à la température du mélange.

Par contre, pour l'énergie de vibration on peut avoir différents cas, selon la valeur du rapport entre le temps de relaxation vibrationnelle et le temps caractéristique de l'écoulement: équilibre, déséquilibre, figeage.

Les variations de population de chaque espèce contenue dans le mélange dues aux interactions entre les espèces mêmes, sont décrites par la cinétique chimique.

L'écoulement peut être à l'équilibre chimique, si le système chimique a le temps de s'adapter aux variations thermodynamiques, ou, au contraire, en déséquilibre, si le système chimique ne peut pas s'adapter complètement aux nouvelles conditions thermodynamiques. Ce cas peut dégénérer en un écoulement figé, si pendant une durée égale à un temps caractéristique de l'écoulement fluide le système chimique n'a pratiquement pas le temps de réagir et donc la composition

chimique du mélange ne change quasiment pas.

### 3.2 Les hypothèses physiques

Dans cette étude on a fait plusieurs hypothèses sur l'écoulement, dont certaines sont simplificatrices pour la modélisation générale du problème:

- le mélange gazeux considéré est l'air,
- chaque espèce du mélange gazeux suit la loi d'état des gaz parfaits,
- en ce qui concerne le tenseur des contraintes, le mélange se comporte comme un fluide newtonien,
- en ce qui concerne la conduction thermique, le fluide suit la loi de Fourier,
- les effets du rayonnement et l'effet Dufour sont négligés,
- l'énergie cinétique de diffusion de chaque espèce est négligée devant son énergie interne,
- pour les phénomènes de diffusion, le mélange suit la loi de Fick,
- l'ionisation est négligée,
- tous les modes internes d'énergie des particules suivent une distribution de Boltzmann,
- les énergies massiques de translation, rotation et vibration sont supposées être à l'équilibre. Les grandeurs thermiques associées à ces énergies sont alors les mêmes et ont pour valeur la température du mélange. L'énergie d'excitation électronique est négligée.

### 3.3 Les équations

Tenant compte des hypothèses précédentes, l'écoulement peut être décrit par les équations de Navier-Stokes pour un mélange gazeux en déséquilibre:

$$W_t + F_1(W)_x + F_2(W)_y + G_1(W)_x + G_2(W)_y = \Omega(W) \quad (1)$$

où  $W$  est le vecteur des variables conservatives:

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho_k \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \end{pmatrix}$$

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

$$G_1(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_k u_k \\ -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xx}u - \tau_{xy}v + q_x + \sum_{k=1}^N \rho_k h_k u_k \end{pmatrix} \quad G_2(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_k v_k \\ -\tau_{yx} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yy}v - \tau_{xy}u + q_y + \sum_{k=1}^N \rho_k h_k v_k \end{pmatrix}$$

$$\Omega(W) = \begin{pmatrix} 0 \\ \omega_k \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

où :  $k = 1, N$ ,  $N$  étant le nombre d'espèces du mélange

$F_1(W), F_2(W)$  sont les flux convectifs

$G_1(W), G_2(W)$  sont les flux diffusifs

$\Omega(W)$  est le vecteur contenant les taux de production des espèces

$\rho$  est la masse volumique du mélange

$\rho_k$  est la masse volumique de l'espèce  $k$

$u, v$  sont les composantes cartésiennes de la vitesse matérielle

$p$  est la pression

$e$  est l'énergie totale par unité de masse

La description détaillée des termes qui apparaissent dans les flux diffusifs sera fournie dans le chapitre suivant.

Selon l'hypothèse que chaque espèce est un gaz parfait, l'équation d'état prend la forme:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{m_k} \quad (2)$$

où :  $\mathcal{R}$  est la constante universelle des gaz parfaits

$T$  est la température

D'autre part, il convient d'exprimer l'énergie en fonction de la température et de la composition. En supposant l'équilibre thermique (une seule température), on peut utiliser une expression du type :

$$E = E_c + H_0 + E_{c_v} + E_{vib} \quad (3)$$

où :  $E = \rho e$  est l'énergie totale par unité de volume

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

$H_0 = \sum_{s=1}^N \rho Y_s h_s^0$  est l'énergie de formation

$E_{c_v} = \sum_{s=1}^N \rho Y_s C_{v,s} T$  est l'énergie interne

$E_{vib} = \sum_{s=P}^N \rho Y_s \frac{\mathcal{R}_s \Theta_{v,s}}{\exp \frac{\Theta_{v,s}}{T} - 1}$  est l'énergie de vibration

$h_s^0$  est l'enthalpie de formation de l'espèce  $s$

$\mathcal{R}_s = \frac{\mathcal{R}}{m_s}$

$\Theta_{v,s}$  est une température caractéristique de vibration à l'équilibre

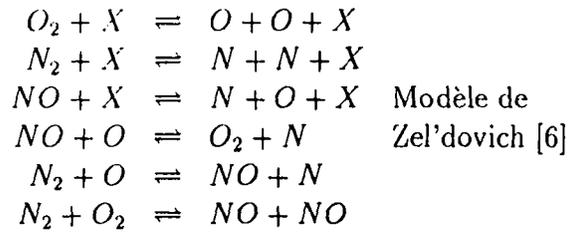
les indices  $s = P, \dots, N$  correspondent aux espèces moléculaires dont l'état vibratoire est supposé à l'équilibre à la température  $T$ .

L'expression des équations de conservation de la masse des espèces dépend du mélange considéré et du modèle chimique utilisé qu'on détaillera dans le paragraphe suivant.

### 3.4 Modèle chimique

Le fluide considéré est l'air, qui, dans les conditions normales de température, se compose principalement d'oxygène et d'azote moléculaires.

La composition varie beaucoup quand la température augmente. A l'avant d'un corps de réentrée la température peut atteindre, dans une zone très mince, plusieurs dizaines de milliers de degrés Kelvin, c'est alors que  $N_2$  et  $O_2$  réagissent pour donner les espèces suivantes:  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $NO$ ,  $N$ ,  $O$ ,  $NO^+$ ,  $O^+$ ,  $N^+$ ,  $O^-$ ,  $N^-$ , ... . Dans notre modèle, on néglige l'ionisation. Les seules espèces présentes seront donc :  $O$ ,  $N$ ,  $NO$ ,  $O_2$  et  $N_2$ . Les réactions chimiques étudiées s'écrivent :



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 auront donc pour effet de baisser fortement la température.

Par définition des fractions massiques, on a :

$$\sum_{s=1}^5 Y_s = 1 \quad (4)$$

Dans la résolution des équations on a supposé le nombre global des atomes de N et O conservé. Cela se traduit en :

$$\frac{\frac{Y_{N_2}}{m_n} + \frac{Y_N}{m_N} + \frac{Y_{NO}}{m_{no}}}{\frac{Y_{O_2}}{m_o} + \frac{Y_O}{m_o} + \frac{Y_{NO}}{m_{NO}}} = \frac{79}{21} \quad (5)$$

car l'air se compose de 79% d'azote et de 21% d'oxygène.

Cette dernière hypothèse n'est pas rigoureusement vraie en présence de phénomènes de diffusion, mais elle est encore valable si les coefficients de diffusion des différentes espèces ne sont pas trop différents (voir Annexe).

Par combinaison de (2) et de (3), on obtient :

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

Ce qui nous autorise à résoudre seulement trois équations de bilan d'espèces . L'expression du taux de production  $\Omega$  est définie par un modèle de cinétique chimique, on utilise ici le modèle de Park [7]. On remarque que, dans le modèle choisi,  $\Omega$  est algébrique en  $\rho Y$  et très fortement non linéaire en T, donc  $\Omega$  varie en fonction de la température [8] qui peut elle-même varier très rapidement en espace.

## 4 TERMES DE TRANSPORT

Sous l'hypothèse précédente de fluide newtonien, les termes du tenseur des contraintes ont la forme suivante :

$$\tau_{xx} = (2\mu + \nu) \frac{\partial u}{\partial x} + \nu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (6)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (7)$$

$$\tau_{yy} = (2\mu + \nu) \frac{\partial v}{\partial y} + \nu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (8)$$

où  $\mu$  et  $\nu$  sont les coefficients de *viscosité* du mélange.  
Pour le coefficient  $\nu$ , on emploie l'hypothèse de Stokes :

$$\nu = -\frac{2}{3}\mu \quad (9)$$

qui n'est vraie rigoureusement que si la "viscosité de volume" est nulle; cette hypothèse apparaît raisonnable pour les écoulements étudiés.

On a supposé aussi que, pour ce qui est de la conductivité thermique, le fluide suit la loi de Fourier.

On peut donc exprimer le flux thermique à l'équilibre comme :

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad (10)$$

$$q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad (11)$$

où  $\lambda$  est la *conductivité thermique* du mélange associée aux degrés de liberté de translation, de rotation et de vibration, supposés à l'équilibre.

Les vitesses de diffusion, enfin, sont exprimées par la loi de Fick :

$$\rho_k v_{kx} = -\rho D_{km} \frac{\partial Y_k}{\partial x} \quad (12)$$

$$\rho_k v_{ky} = -\rho D_{km} \frac{\partial Y_k}{\partial y} \quad (13)$$

où  $D_{km}$  est le coefficient de *diffusion* de l'espèce  $k$ .

L'expression des vitesses de diffusion fournie par la loi de Fick est une simplification de celle obtenue à partir de la théorie cinétique des gaz basée sur les hypothèses suivantes:

- la diffusion thermique (effet Soret) et de pression sont négligeables,
- le mélange se comporte comme un mélange binaire.

Cette dernière simplification est consistante avec les hypothèses faites dans la modélisation des coefficients de conductivité et viscosité, qu' on exposera dans la suite.

On remarque aussi que la loi de Fick n'assure pas à priori la conservation de la masse globale du mélange, d'où la nécessité de l'imposer fortement dans la résolution du problème (voir Annexe).

#### 4.1 Calcul des termes de transport par la théorie cinétique des gaz

Dans le modèle décrit, la modélisation des termes de transport se réduit à celle des coefficients de viscosité  $\mu$  et conductivité  $\lambda$  du mélange et des coefficients de diffusion de chaque espèce  $D_{km}$ .

A cause de la complexité des écoulements hypersoniques étudiés, les caractéristiques globales du mélange dépendent fortement des interactions entre particules de différentes espèces.

Pour une modélisation précise des termes de transport on doit donc partir d'une description microscopique de l'écoulement, comme celle fournie par la théorie cinétique des gaz.

L'évolution de l'écoulement peut être décrit par les équations de Boltzmann (une pour chaque espèce).

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{m_i} (\vec{p}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}_i}) = K_{ij} \quad (14)$$

où  $f_i = f_i(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)$  est la *fonction de distribution*, qui décrit le nombre probable de molécules à l'état quantique  $i$  ayant leurs coordonnées comprises dans un voisinage de rayon  $d\vec{r}_i$  autour de la position  $\vec{r}_i$ , et leur quantité de mouvement comprise dans l'intervalle  $(\vec{p}_i - d\vec{p}_i, \vec{p}_i + d\vec{p}_i)$ .

$K_{ij}$  sont les *intégrales de collision* et décrivent le nombre de molécules quittant ou rejoignant l'état considéré à cause des collisions moléculaires.

L'état d'équilibre microscopique est rejoint quand le nombre de molécules de type  $i$ , ayant vitesse donnée, qui changent d'état à cause des collisions avec des molécules du niveau  $j$ , ayant vitesse  $v'$ , est exactement équilibré par le nombre des molécules qui changent d'état, à cause des collisions inverses.

Les intégrales de collision sont donc nulles à l'équilibre.

Une expression de la fonction de distribution à l'équilibre largement employée dans la littérature est celle proposée par Maxwell :

$$f_i = n_i \left( \frac{m_i}{2\pi KT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-m_i \frac{v^2}{2KT}\right) \quad (15)$$

où :  $n_i$  est le nombre des molécules de l'espèce  $i$

$m_i$  est la masse molaire de l'espèce  $i$

$K$  est la constante de Boltzmann

Les termes de transport du mélange peuvent être calculés exactement par résolution et intégration des équations de Boltzmann.

Une technique très connue est celle de Chapman et Enskog [2].

Les équations de Boltzmann sont développées autour de la distribution de Maxwell et les termes de premier ordre sont employés pour le calcul des coefficients de transport, pour des écoulements décrits par les équations de Navier-Stokes.

Les expressions ainsi obtenues sont, pour des mélanges de plusieurs espèces, très compliquées, car l'évaluation de matrices complexes est nécessaire [2].

L'implémentation des expressions de Chapman - Enskog pour les termes de transport dans un schéma de résolution numérique des écoulements hypersoniques n'est donc pas envisagée.

## 4.2 Modèle proposé par Yos

Le modèle proposé par Yos, dont on présente une brève description dans la suite, a été étudié, par exemple, par P.A. Gnoffo et al. dans [12] et employé dans la résolution numérique d'écoulements hypersoniques par P. Gubernatis dans [16] (écoulements internes en tuyère).

### 4.2.1 Coefficients de viscosité et de conductivité

Dans le modèle proposé par Yos [1], on obtient les coefficients de viscosité et de conductivité du mélange comme moyenne, pondérée par les fractions molaires, des coefficients binaires calculés par la théorie cinétique des gaz.

$$\mu = \sum_{i=1}^{K_m} \frac{m_i x_i}{\sum_{j=1}^{K_m} x_j \Delta_{ij}^{(2)}} \quad (16)$$

$$\lambda = \lambda_t + \lambda_r + \lambda_v \quad (17)$$

$$\lambda_t = \frac{15}{4} K \sum_{i=1}^{K_m} \frac{x_i}{\sum_{j=1}^{K_m} x_j \Delta_{ij}^{(2)} a_{ij}} \quad (18)$$

$$\lambda_r = K \sum_{i=1}^{K_p} \frac{x_i}{\sum_{j=1}^{K_m} x_j \Delta_{ij}^{(1)}} \quad (19)$$

$$\lambda_v = \lambda_r \quad (20)$$

où :

$$a_{ij} = 1 + \frac{(1 - \frac{m_i}{m_j})(0.45 - 2.54 \frac{m_i}{m_j})}{(1 + \frac{m_i}{m_j})^2} \quad (21)$$

$$\Delta_{ij}^{(1)} = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{2m_i m_j}{\pi K T (m_i + m_j)}} \pi K_{ij}^{(1,1)} \sigma_{0ij}^2 \quad (22)$$

$$\Delta_{ij}^{(2)} = \frac{16}{5} \sqrt{\frac{2m_i m_j}{\pi K T (m_i + m_j)}} \pi K_{ij}^{(2,2)} \sigma_{0ij}^2 \quad (23)$$

où :  $\lambda_t, \lambda_r, \lambda_v$  sont les coefficients de conductivité associés aux énergies de translation, rotation et vibration  
 $x_i$  est la fraction molaire de l'espèce  $i$   
 $m_i$  est la masse molaire de l'espèce  $i$   
 $K_{ij}^{(2,2)}$  sont les intégrales de collision  
 $\sigma_{0ij}$  est la section normale de collision  
 $K_m$  est le nombre d'espèces  
 $K_p$  est le nombre d'espèces polyatomiques

## 4.2.2 Coefficients de diffusion

Dans le modèle de Yos on calcule un coefficient de diffusion pour chaque espèce du mélange, obtenu comme moyenne des coefficients de diffusion binaires.

$$D_{km} = \frac{1 - x_k}{N \sum_{i=1, i \neq k} \frac{x_i}{D_{ki}}} \quad (24)$$

où  $D_{ki}$  est le coefficient de diffusion binaire, dont l'expression est la suivante :

$$D_{ki} = \frac{KT}{p\Delta_{ij}^{(1)}} \quad (25)$$

où  $p$  est la pression. Pour les autres symboles, voir le paragraphe précédent. On remarque que dans les expressions des coefficients de transport du modèle de Yos apparaissent des intégrales de collision. Le problème de l'évaluation de telles intégrales sera l'objet du paragraphe suivant.

## 4.3 Evaluation des intégrales de collision

Dans cette étude, pour l'évaluation des intégrales de collision, on fait l'hypothèse que les collisions soient de type élastique.

Le champ des forces internes dérive donc d'un potentiel et les intégrales de collision sont des fonctions du *potentiel de collision*.

Ce potentiel prend, dans la littérature, différentes formes, définies d'une façon semi-empirique.

On trouve donc, dans la littérature, en fonction du choix du potentiel, les intégrales de collision, calculées pour différentes espèces et tabulées en fonction de la température (voir paragraphe suivant).

## 4.4 Description des modèles étudiés

Dans ce travail on a étudié principalement quatre modélisations des termes de transport, de différents niveaux de complexité et de précision.

Dans le plus élémentaire des modèles étudiés, le coefficient de viscosité du mélange est calculé en fonction de la température  $T$  par la formule semi-empirique

de Sutherland :

$$\mu = 0.00001789 \frac{288. + 110.}{T + 110.} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{1.5} \quad (26)$$

Le coefficient de conductivité est calculé en supposant constant dans tout le domaine le nombre de Prandtl, dont l'expression est la suivante :

$$Pr = \frac{\mu \, cp}{\lambda} \quad (27)$$

où  $cp$  est le coefficient de chaleur à pression constante.

Enfin les coefficients de diffusion des différentes espèces ont la même valeur, qui est calculée en supposant le nombre de Lewis égal à l'unité dans tout le domaine.

Le nombre de Lewis est donné par :

$$Le = \frac{\rho \, cp \, D_m}{\lambda} \quad (28)$$

Le modèle décrit sera appelé dans la suite "*modèle de Sutherland*".

Le deuxième est une simplification du modèle proposé par Candler dans [9].

Le coefficient de viscosité de l'espèce  $i$  est calculé par la formule de Blottner [10], basée sur l'interpolation des résultats obtenus pour l'air sur la base de la théorie de Chapman - Enskog .

$$\mu_i = 0.1 \exp[(A_i \ln T + B_i) \ln T + C_i] \quad (29)$$

où  $A_i, B_i, C_i$  sont des constantes données.

La conductivité thermique de chaque espèce est calculée par la relation d'Eucken :

$$\lambda_i = \mu_i \left( \frac{5}{2} c_{vtr,i} + c_{vrot,i} + c_{vvib,i} \right) \quad (30)$$

On obtient la viscosité et la conductivité du mélange à partir des expressions (24) et (25) par la formule empirique de Wilke [3].

$$\mu = \sum_{i=1}^N \frac{\Psi_i \mu_i}{\Phi_i} \quad (31)$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^N \frac{\Psi_i \lambda_i}{\Phi_i} \quad (32)$$

avec :

$$\Psi_i = \frac{Y_i m}{m_i} \quad (33)$$

$$\Phi_i = \sum_{r=1}^N \Psi_r \left( 1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_r}} \left( \frac{m_r}{m_i} \right)^{\frac{1}{2}} \right)^2 \left( \sqrt{8 \left( 1 + \frac{m_i}{m_r} \right)} \right)^{-1} \quad (34)$$

Dans ce modèle, comme dans le précédent, les coefficients de diffusion de chaque espèce ont la même valeur, calculée en supposant le nombre de Lewis (23) constant, égal à l'unité.

Les dernières modélisations sont basées sur le modèle de Yos et diffèrent seulement dans l'évaluation des intégrales de collision.

Dans l'une (*modèle de Gnoffo*), les intégrales de collisions sont évaluées par la fonction logarithmique d'interpolation des données dans [11], proposée par Gnoffo et al. dans [12]. Dans l'autre (*modèle de Lennard - Jones*), on interpole linéairement les valeurs des intégrales de collision dans [2] et [13], calculées pour différentes températures, en choisissant le potentiel de collision proposé par Lennard - Jones.

## 5 SIMULATION NUMERIQUE D'ÉCOULEMENTS HYPERSONIQUES

Les équations de Navier Stokes pour un mélange gazeux hors équilibre, avec les différentes modélisations des termes de transport décrites au paragraphe précédent, sont résolues numériquement pour des écoulements hypersoniques externes.

On s'intéresse aux solutions stationnaires que l'on obtient par intégration en temps à partir d'une condition initiale arbitraire.

Cet artifice est utilisé à cause des régions subsoniques contenues dans le domaine, dans lesquelles le système est elliptique.

L'intégration en temps est donc utilisée pour construire un processus itératif convergeant vers la solution stationnaire.

### 5.1 Schéma de discrétisation

La méthode numérique repose sur le découplage entre le système des équations de Navier Stokes et les lois de bilan d'espèces. Elle a été développée à l'origine par N. Botta [15] et étendue à différents modèles.

On calculera d'abord, la composition chimique locale étant figée, mais non uniforme, les variables usuelles de l'écoulement :  $\rho, \rho u, \rho v, E$ .

Puis, à champ de vitesse figé, on réévalue la composition chimique.

Le couplage est réalisé par l'équation de bilan de l'énergie du mélange. Cette technique de discretisation consistante et facile à mettre en oeuvre a été éprouvée par une experimentation importante [4] [5] [8] [15] [14].

Le schéma de discrétisation en temps des équations de Navier Stokes est explicite d'ordre un.

Pour les équations de bilan des espèces, on emploie un schéma semi-implicite, au sens où les termes de convection sont approchés par une formulation explicite et le terme source de façon implicite.

L'approximation spatiale repose sur une formulation mixte de type Volumes Finis / Éléments Finis et sur l'emploi d'un maillage de type Éléments Finis.

Pour les flux convectifs, on utilise une formulation Volumes Finis. Le calcul de ces flux est fait selon un schéma décentré de Van Leer adapté aux écoulements de gaz réactif par la technique du "γ équivalent" [8].

Pour l'approximation spatiale des flux visqueux on emploie une interpolation de type Éléments Finis P1, qui nous fournit un schéma centré en supposant que les variables physiques intervenant dans les termes visqueux sont linéaires dans

chaque triangles du maillage.

Les flux diffusifs sont alors constants sur le triangle et on utilise des moyennes des termes qui apparaissent sans dérivation, comme par exemple les coefficients de transport.

Pour obtenir un schéma précis à l'ordre deux en espace, performant dans la résolution de chocs et discontinuités de contact, on a employé un schéma demi-totalement décentré dans le champ et centré à la paroi.

On renvoie à [4] et [5] pour une description détaillée de l'adaptation de la technique MUSCL aux écoulements visqueux réactifs.

## 5.2 Conditions aux bords

### 5.2.1 La paroi

Sur la paroi, on applique des conditions d'adhérence et de paroi isotherme en formulation forte ( $v=0$ ).

Pour un noeud  $i$  situé sur la paroi, on évalue d'abord les masses volumiques du mélange et de chaque espèce, en supposant nuls les flux de masse à travers la paroi elle même.

L'énergie totale est alors déduite de l'équation (3) du chapitre 3 dans laquelle l'énergie cinétique est mise à zéro.

On remarque que l'hypothèse de paroi isothermique et non catalytique peut être grossière d'un point de vue physique, lorsque la paroi est généralement partiellement catalytique (plus ou moins, selon le matériau qui la constitue).

Dans cette étude on a cependant choisi de garder cette hypothèse, parce qu'elle simplifie notablement l'implémentation numérique. Les effets de paroi catalytique seront étudiés ultérieurement.

### 5.2.2 Bord entrant

Pour les flux visqueux, on applique des conditions de type Neumann, c'est à dire que l'on considère que les flux numériques correspondants aux termes visqueux sont nuls à travers ces bords.

Pour les flux convectifs, l'écoulement étant supersonique, on calcule le flux entre le point même et l'état  $W_\infty$ , qui correspond à l'état initial à l'amont du choc (spécification complète de l'écoulement).

### 5.2.3 Bord sortant

Pour un fluide visqueux, l'écoulement est subsonique dans la couche limite, donc, si l'on souhaite utiliser un schéma décentré sur cette paroi, il faut connaître une valeur représentative du champ à l'extérieur.

Il est difficile, dans les cas étudiés, de prévoir la valeur de ce champ à l'extérieur. Une manière de contourner cette difficulté, qui a été employée dans ce travail, est de ne pas décentrer, en calculant le flux au point même.

## 5.3 Tests numériques

Afin d'avoir une idée préliminaire des différences entre les modèles étudiés, on a comparé les valeurs des coefficients de transport calculés pour une pression fixée, une température variable dans un intervalle donné, la composition chimique étant calculée en supposant l'écoulement à l'équilibre.

Ensuite la méthode numérique décrite a été employée pour la résolution d'écoulements hypersoniques externes.

Afin de mettre en évidence l'influence du modèle physique sur la qualité de la solution numérique, on a résolu le même cas test par le même schéma numérique, avec les quatre différentes modélisations des termes de transport décrites au chapitre précédent.

On s'est intéressé surtout à des écoulements qui reproduisent des conditions voisines de celles de la rentrée atmosphérique d'une navette.

On a étudié deux géométries différentes: d'abord une géométrie très simple de corps arrondi et après la configuration de double ellipse, proposée dans un des cas tests du "Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems . Antibes 1991".

### 5.3.1 Comparaison des coefficients de transport

On a choisi comme valeur de la pression 0.1 atm. et comme intervalle de température (1500 – 3000K), afin d'avoir des conditions proches de celles qui se réalisent dans la couche limite pour les écoulements étudiés.

Aux figures 1 et 2 on présente les coefficients de viscosité et de conductivité pour les quatre modèles étudiés. On remarque que les modèles de Sutherland et de Lennard-Jones sont sensiblement moins visqueux que les deux autres, surtout aux températures élevées. En ce qui concerne le coefficient de conductivité, les valeurs fournies par les modèles de Gnoffo et Lennard-Jones sont plus élevées que les autres.

A la figure 3 on présente enfin les coefficients de diffusion des différentes espèces pour le modèle de Lennard-Jones et le coefficient de diffusion du modèle de Candler. Les coefficients de diffusion du modèle de Lennard-Jones ne varient presque pas entre les espèces, mais ils sont visiblement différents de la valeur correspondant au modèle de Candler, surtout aux températures élevées.

### 5.3.2 Corps arrondi

Les conditions en amont sont celles de l'atmosphère standard à 75 km d'altitude, le nombre de Mach est égal à 25 et le rayon du demi - cylindre est de 1m. On a fixé la température à la paroi à 1500K et l'incidence est nulle.

Le maillage employé (figure 4) est le même que N. Glinsky a utilisé pour les calculs décrits dans sa thèse [5].

Ce maillage est raffiné plusieurs fois près de la paroi, afin de capturer les phénomènes qui se produisent dans la couche limite.

On a effectué les calculs avec les modèles de Sutherland, Gnoffo, Lennard - Jones, avec une précision en espace d'ordre un et d'ordre deux.

Les résultats obtenus ont été comparés aussi aux résultats présentés en [5], où le même cas test a été résolu en employant la même méthode numérique et la modélisation des termes de transport de Candler.

On représente en figure 5 et 6 les isovaleurs du nombre de Mach ( $\Delta M = 1$ ) et de la température ( $\Delta T = 500$ ), pour des résultats d'ordre 1 en espace, pour les trois différentes modélisations.

Dans le champ, on ne remarque aucune différence importante entre les résultats obtenus avec les quatre modélisations différentes (pour le modèle de Candler voir [5]).

Cette observation est confirmée aussi par les calculs d'ordre 2 en espace, dont en figure 7 et 8 sont représentés les isovaleurs du nombre de Mach ( $\Delta M = 1$ ) et de la température ( $\Delta T = 500$ ).

On remarque que l'écoulement étudié présente une couche limite mince attachée au corps, où sont concentrés les effets de termes diffusifs. Il n'est donc pas surprenant que la modélisation des termes de transport affecte aussi peu la solution dans le champ.

Par contre, on pourrait s'attendre à une structure de couche limite assez sensible aux différents modèles étudiés, surtout en ce qui concerne l'épaisseur, ce qui n'est pas confirmé par cette expérience. En effet, une estimation grossière de l'épaisseur de la couche limite est donnée par la taille de la région subsonique dans la direction normale au corps. Or, des lignes isovaleurs du nombre de Mach, il apparaît clairement, pour les résultats d'ordre un comme pour ces d'ordre deux, que cette estimation de l'épaisseur ne varie presque pas d'une so-

d'ordre deux, que cette estimation de l'épaisseur ne varie presque pas d'une solution à l'autre.

Pour ce qui concerne la "chimie", on peut faire les considérations suivantes :

- pour tous les modèles, l'oxygène est complètement dissocié au corps,
- pour tous les modèles, la fraction massique de l'espèce  $NO$  est négligeable à la paroi par rapport aux fractions massiques des autres espèces produites de la dissociation de l'air,
- on peut remarquer quelques différences, bien que légères, entre les différentes modélisations, pour ce qui est des isovaleurs de l'espèce  $N$  (figure 9).

Dans cette étude de l'écoulement autour d'un corps arrondi, vue la régularité de la géométrie, on ne s'attendait pas à une structure complexe de la couche limite. Pour cette raison, on n'a pas approfondi l'analyse locale de telle structure (profils des variables physiques, coupes du coefficient de friction ou du nombre de Stanton sur le corps ...), mais on a choisi de passer à l'étude de l'écoulement autour d'une géométrie plus complexe, comme celle de la double ellipse proposé parmi les cas tests du "Workshop on Hypersonique Flows for Reentry Problems, Antibes 1991".

### 5.3.3 Double ellipse

On a étudié l'écoulement autour de la géométrie de double ellipse proposée parmi les cas tests du "Workshop on Hypersonique Flows for Reentry Problems, Antibes 1991".

Les conditions en amont sont celles de l'atmosphère standard à une altitude de 75 Km, le nombre de Mach est égal à 25 et l'incidence est de 30 degrés (pour les détails sur les conditions à l'infini amont voir [14]). On a fixé la température à la paroi à 1500 deg  $K$ .

On a employé un maillage à 6050 noeuds, représenté en figure 10. Ce maillage est particulièrement fin près de la paroi, afin de capturer les phénomènes physiques qui se produisent dans cette zone.

On remarque aussi que ce maillage, bien que triangulaire, est localement normal à la paroi (ceci simplifie l'évaluation numérique des gradients normaux des variables).

On a effectué des calculs précis en espace à l'ordre 1 et à l'ordre 2. Dans ce travail, on s'est intéressé à l'influence de la modélisation physique et pas à l'influence de la précision de l'approximation spatiale, déjà étudiée par N. Glynsky in [5]. Donc on présente que les résultats à l'ordre 2.

On représente, pour les quatre modèles considérés, les isovaleurs du nombre de Mach ( $\Delta M = 0.25$ ), dans les figures 11 et 12, et les isovaleurs de la température

( $\Delta T = 500.$ ), dans les figures 13 et 14.

On obtient ici, comme dans le cas du corps arrondi, un écoulement à couche limite assez mince et attachée au corps.

L'observation des isovaleurs du nombre de Mach et de la température permet de faire les considérations suivantes:

- en accord avec les caractéristiques de l'écoulement, dans la plupart du domaine on ne remarque pas des différences importantes,

- pour ce qui concerne une évaluation préliminaire de la viscosité de l'écoulement et de l'épaisseur de la couche limite, il semble que les *modèles de Sutherland et Lennard - Jones* soient légèrement moins visqueux que ceux de *Gnoffo et Candler*, en accord avec les considérations faites dans le paragraphe 5.3.1.

Pour une meilleure compréhension des différences entre les résultats obtenus avec les quatre modèles on a approfondi l'analyse locale de la couche limite.

En particulier, on compare les valeurs de plusieurs variables, des coefficients de transport, du coefficient de friction et du nombre de Stanton à la paroi, pour les quatre différents modèles.

En figures 15 et 16 sont présentés les coefficients de viscosité et de conductivité à la paroi.

Les valeurs de coefficients de viscosité confirment que les modèles de *Lennard - Jones et Sutherland* sont moins visqueux par rapport aux autres.

Pour ce qui concerne la conductivité, le modèle de *Sutherland* fourni des valeurs plus bas par rapport aux autres.

On présente aussi les coupes de nombre de Stanton et du coefficient de friction, qui sont définis par les formules suivantes:

$$St = \frac{q_w}{\rho_\infty u_\infty c_{p\infty} (T_{0\infty} - T_w)} \quad (35)$$

$$C_f = \frac{\tau_w}{0.5 \rho_\infty u_\infty^2} \quad (36)$$

où :  $q_w = -\lambda \nabla T \cdot n$  est le flux de chaleur à la paroi,

$\rho_\infty, u_\infty, c_{p\infty}$  sont la masse volumique, la vitesse et le coefficient de pression à l'infini amont,

$T_{0\infty}$  est la température d'arrêt isoentropique,

$T_w$  est la température à la paroi,

$\tau_w$  représente la friction à la paroi.

L'allure des coupes du nombre de Stanton (figure 17) et du coefficient de friction (figure 15) reflète les différences observées parmi les coefficients de conductivité et de viscosité. Mais les écarts entre les valeurs des différents modèles ne sont

que de quelques pourcents.

En ce qui concerne la composition du mélange gazeux à la paroi, on peut faire les considérations suivantes:

- pour tous les modèles, l'oxygène est complètement dissocié en oxygène monoatomique,
- pour tous les modèles, la fraction massique de  $NO$  est négligeable par rapport à celles de l'oxygène et de l'azote monoatomiques,
- en figure 18 et 19 sont représentées les fractions massiques à la paroi de l'espèce  $N$ . On peut remarquer des différences évidentes parmi les quatre modèles étudiés.

On a représenté aussi les profils de température, nombre de Mach et fractions massique de l'espèce  $N$ , pour deux sections sur le dos (avant et après la cabine) et une sur le ventre (figures 20 - 28).

On peut remarquer des différences sensibles parmi les modèles seulement sur les valeurs de la fraction massique de  $N$ .

## 6 CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Dans ce travail on a présenté une étude préliminaire de l'influence de la modélisation physique des termes de transport dans la résolution numérique d'écoulements hypersoniques.

On s'est limité à l'étude d'écoulements en conditions voisines de celles de la rentrée atmosphérique d'une navette spatiale, pour des géométries de corps arrondi et de double ellipse.

On a employé, pour chaque cas test, la même méthode numérique de type Elements Finis / Volumes Finis, avec quatre modèles des termes de transports de complexité différente.

Les résultats obtenus montrent pour tous les écoulements étudiés une structure de couche limite mince attachée au corps.

Dans ces conditions, les termes diffusifs et visqueux jouent un rôle important seulement dans la couche limite.

Les résultats numériques sont en accord avec cette caractéristique de l'écoulement : en fait, dans la plupart du domaine de calcul on ne remarque pas des différences parmi les modèles.

En ce qui concerne la structure de la couche limite, dont on a fait une analyse détaillée pour le cas de la double ellipse, on peut tirer les conclusions suivantes :

- l'épaisseur de la couche limite ne semble pas varier beaucoup, bien que les modèles de Sutherland et de Lennard-Jones soient sensiblement moins visqueux que les autres,
- la charge thermique et le coefficient de friction à la paroi (le nombre de Stanton) pour les quatre modèles présentent des légères différences,
- les coupes de la fraction massique de l'espèce  $N$  sont sensiblement différentes parmi les modèles,
- en ce qui concerne les profils présentés on remarque des différences parmi les modèles seulement pour la fraction massique de l'espèce  $N$ .

En conclusion, on a l'impression que dans les écoulements étudiés, la modélisation des termes de transport n'influence pas fortement la structure de la couche limite.

L'emploi d'un modèle très raffiné et très coûteux ne semble donc pas nécessaire, pour avoir une évaluation numérique raisonnable de la charge thermique et aérodynamique sur une navette à la rentrée atmosphérique.

Cependant, il faut quand même remarquer que, parmi les hypothèses faites dans cette étude, celles d'équilibre vibrationnel et de paroi isothermique sont assez grossières.

Une conclusion plus définitive ne pourra donc être tirée qu'à la suite de l'étude

des effets du déséquilibre thermique et de catalycité de la paroi.  
On pense que surtout ce dernier phénomène pourra avoir une influence non négligeable sur la structure de la couche limite et sur la charge à la paroi, car on observe dans la présente étude que les réactions chimiques dans la couche limite tendent à émousser les différences parmi les modèles.

## **7 REMERCIEMENTS**

Les auteurs remercient Jean-Antoine Désidéri et Francesco Grasso d'avoir permis cette action de collaboration entre l'I.N.R.I.A. Sophia Antipolis et l'Université "La Sapienza" de Rome.

## 8 ANNEXE: LOIS DE CONSERVATION

### 8.1 Conservation du nombre d'atomes de $N$ et $O$

#### 8.1.1 Ecoulements non visqueux

Pour les écoulements non visqueux, le nombre global d'atomes de  $N$  et  $O$  est conservé dans tout le domaine.

En effet, soient  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  respectivement le nombre d'atomes de  $N$  et de  $O$  dans l'espèce  $i$ ; on peut écrire, pour chaque réaction  $R_j$ , les équations de bilan suivantes:

$$\sum_{i=1}^s \alpha_i (\sigma'_{ij} - \sigma''_{ij}) = 0 \quad (37)$$

$$\sum_{i=1}^s \beta_i (\sigma'_{ij} - \sigma''_{ij}) = 0 \quad (38)$$

où  $\sigma'_{ij}$  et  $\sigma''_{ij}$  sont les coefficients stoechiométriques.

On a donc, d'après la définition des termes de production des espèces

$$(\Omega_i = \sum_{j=1}^r (\sigma''_{ij} - \sigma'_{ij}) J_j m_i):$$

$$\sum_{i=1}^s \alpha_i \frac{\Omega_i}{m_i} = \sum_{i=1}^s \alpha_i \sum_{j=1}^r (\sigma''_{ij} - \sigma'_{ij}) J_j = \sum_{j=1}^r J_j \sum_{i=1}^s \alpha_i (\sigma''_{ij} - \sigma'_{ij}) = 0 \quad (39)$$

$$\sum_{i=1}^s \beta_i \frac{\Omega_i}{m_i} = \sum_{i=1}^s \beta_i \sum_{j=1}^r (\sigma''_{ij} - \sigma'_{ij}) J_j = \sum_{j=1}^r J_j \sum_{i=1}^s \beta_i (\sigma''_{ij} - \sigma'_{ij}) = 0 \quad (40)$$

où:  $s$  et  $r$  sont respectivement le nombre d'espèces et de réactions,

$\Omega_i$  est le taux de production de l'espèce  $i$ ,

pour l'expression de  $J_j$  voir [7] et [5].

De plus, à l'état stationnaire, compte tenu de l'équation de bilan de la masse globale, l'équation de bilan d'espèces devient:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla Y_i = \Omega_i \quad (41)$$

D'où, en combinant (39) - (41):

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{m_i} Y_i = 0 \quad (42)$$

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\beta_i}{m_i} Y_i = 0 \quad (43)$$

Et donc les quantités  $\sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{m_i} Y_i$  et  $\sum_{i=1}^s \frac{\beta_i}{m_i} Y_i$  sont constantes sur chaque ligne de courant.

Si toutes les lignes de courant émanent d'un écoulement uniforme, on a dans tout le domaine:

$$\sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{m_i} Y_i = A \quad (44)$$

$$\sum_{i=1}^s \frac{\beta_i}{m_i} Y_i = B \quad (45)$$

Pour l'air en conditions standard (79% d'azote et 21% d'oxygène), cela se traduit dans la relation (5) du paragraphe (3.4).

### 8.1.2 Ecoulements visqueux

Pour les écoulements visqueux à l'état stationnaire l'équation de bilan des espèces prend la forme suivante:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla Y_i + \nabla \cdot (-\rho D_i \nabla Y_i) = \Omega_i \quad (46)$$

D'où:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{m_i} Y_i + \nabla \cdot (-\rho D_i \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\alpha_i}{m_i} Y_i) = 0 \quad (47)$$

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\beta_i}{m_i} Y_i + \nabla \cdot (-\rho D_i \nabla \sum_{i=1}^s \frac{\beta_i}{m_i} Y_i) = 0 \quad (48)$$

On constate que lorsque le coefficient  $D_i$  est le même pour toutes les espèces, alors les équations (44) et (45) sont encore des intégrales premières de (47) et (48). Par contre, en général, ces relations ne sont plus vérifiées.

## 8.2 Conservation de la masse globale

D'après la définition des taux de production d'espèces (voir paragraphe précédent), on a:

$$\sum_{i=1}^s \Omega_i = 0 \quad (49)$$

En conséquence, dans le cas d'un fluide non visqueux, en sommant (41) sur tout  $i$ , on obtient à l'état stationnaire:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \sum_{i=1}^s Y_i = 0 \quad (50)$$

La quantité  $\sum_{i=1}^s Y_i$  est donc constante par ligne de courant; en fait, elle est constante partout:

$$\sum_{i=1}^s Y_i = 1 \quad (51)$$

ce qui traduit la conservation de la masse.

Cependant, dans le cas d'un fluide visqueux, en sommant (46) sur tout  $i$ , on obtient à l'état stationnaire:

$$\rho \vec{v} \cdot \nabla \left( \sum_{i=1}^s Y_i \right) + \nabla \cdot \left( -\rho \sum_{i=1}^s D_i \nabla Y_i \right) = 0 \quad (52)$$

Cette équation admet la solution particulière  $\sum_{i=1}^s Y_i = \text{const} = 1$  dans le cas où  $D_i = D$  pour tout  $i$ . Par contre, pour un modèle de diffusion général, les équations de bilan d'espèces n'impliquent pas la conservation de la masse globale.

# 9 FIGURES

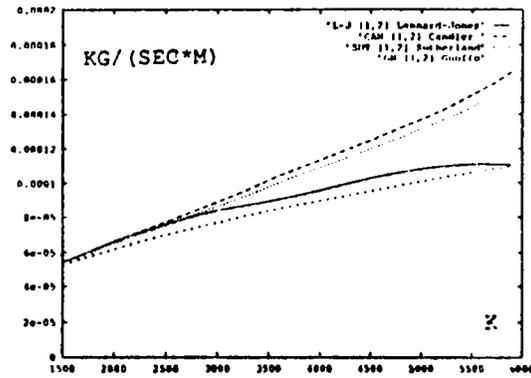


Figure 1: Coefficients de viscosité

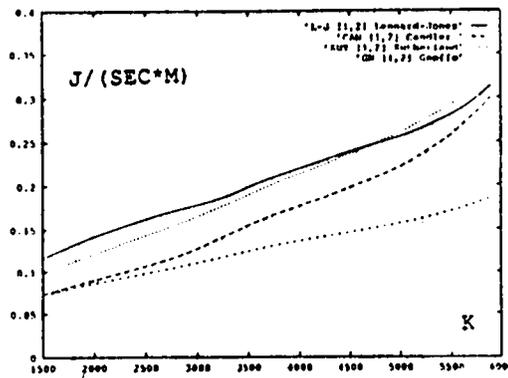


Figure 2: Coefficients de conductivité

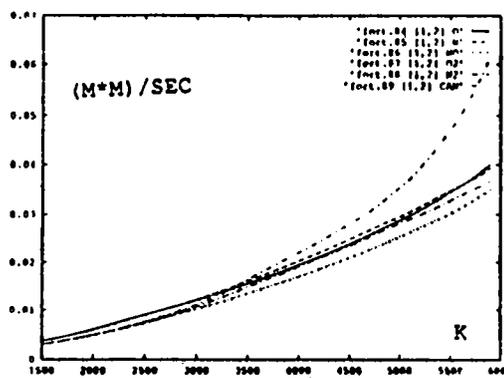


Figure 3: Coefficients de diffusion

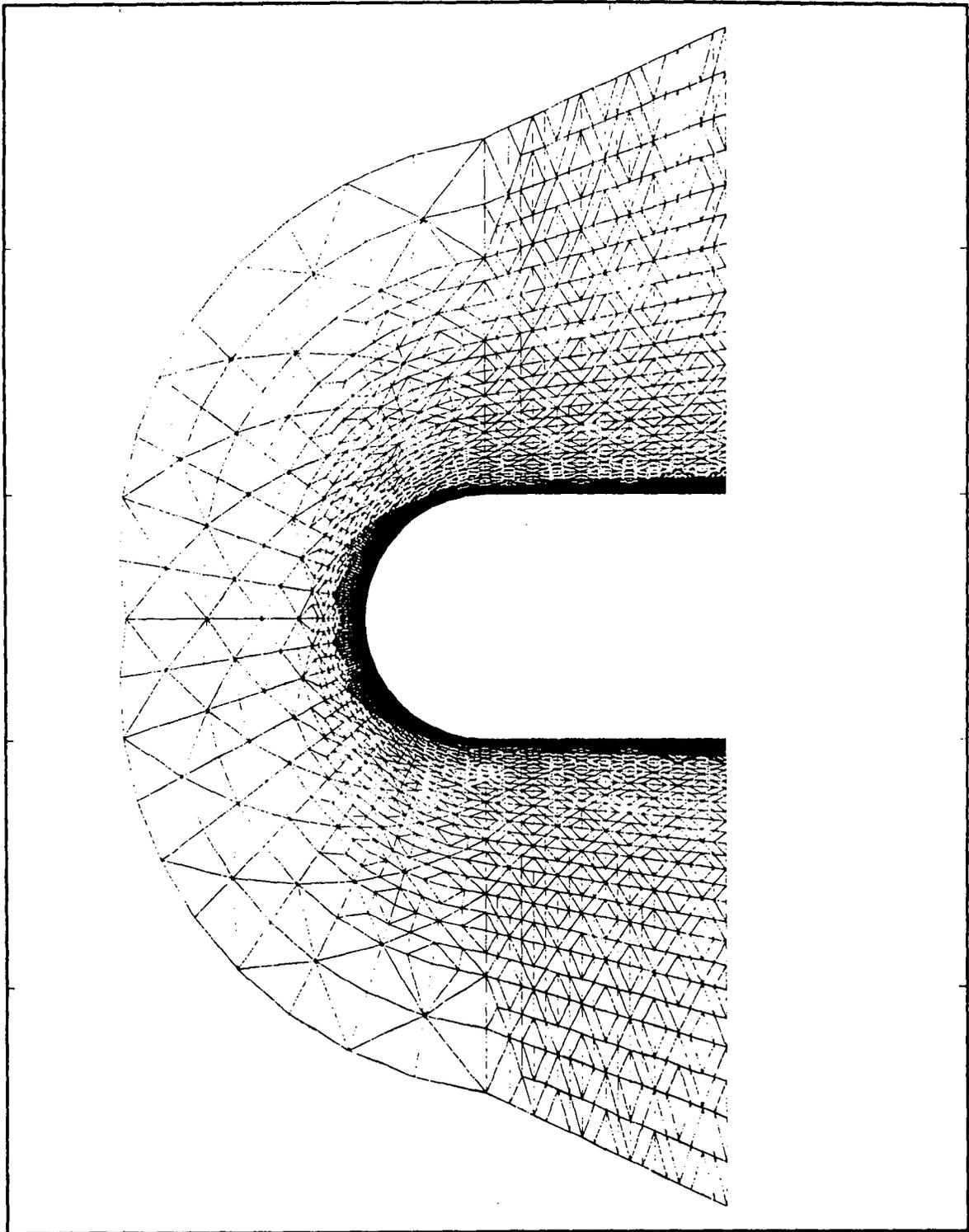
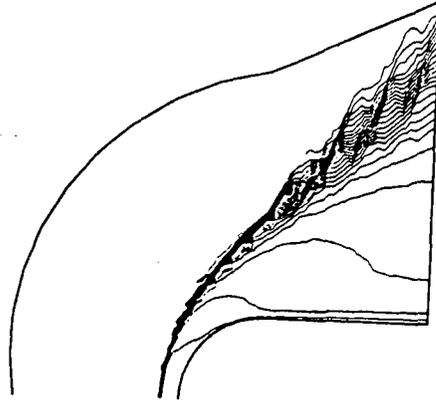
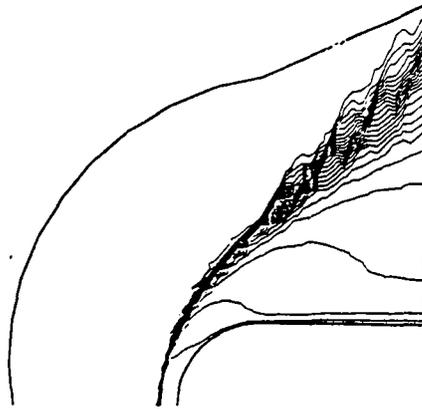


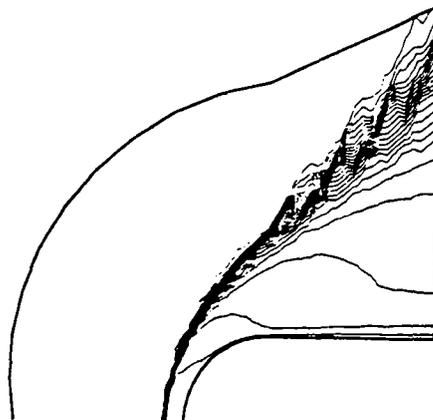
Figure 4: Maillage autour du corps arrondi (4234 points)



Modèle de Sutherland

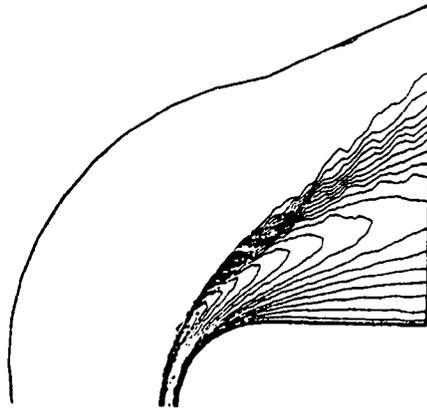


Modèle de Gnoffo

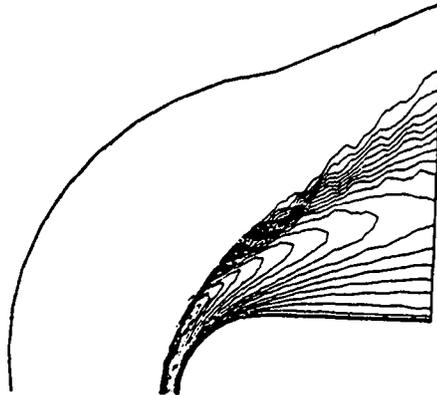


Modèle de Lennard-Jones

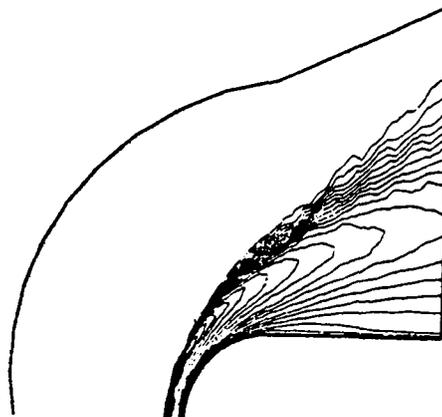
Figure 5: Isovaleurs du nombre de Mach. Ordre 1



Modèle de Sutherland

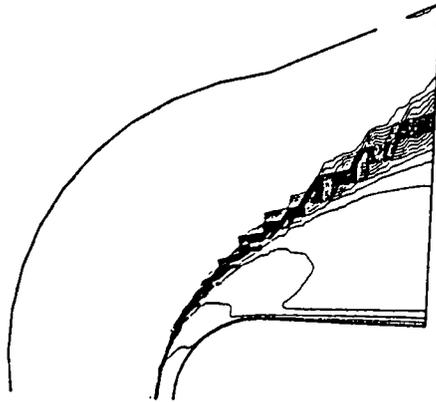


Modèle de Gnoffo

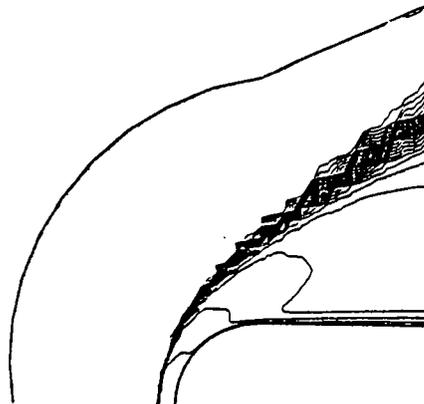


Modèle de Lennard-Jones

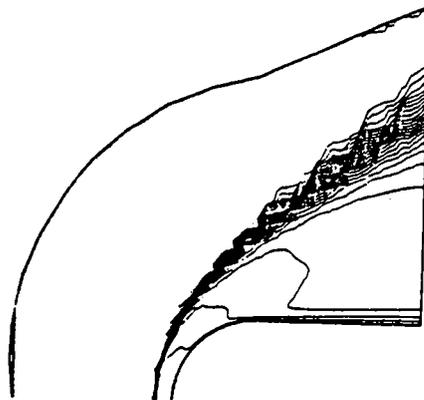
Figure 6: Isovaleurs de la température. Ordre 1



Modèle de Sutherland

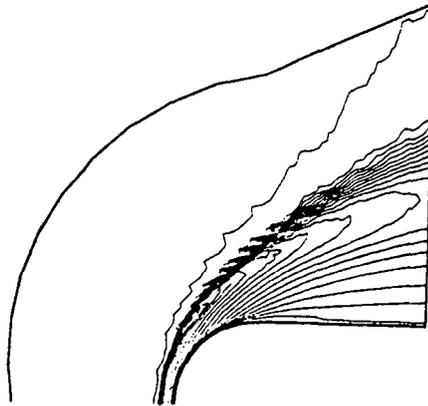


Modèle de Gnoffo

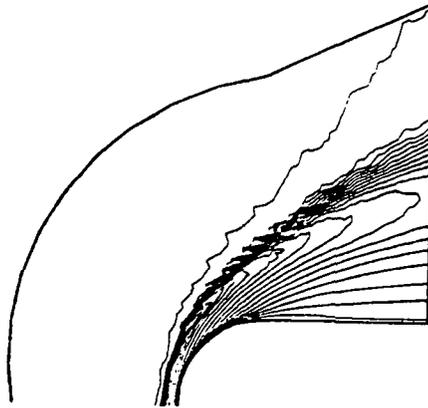


Modèle de Lennard-Jones

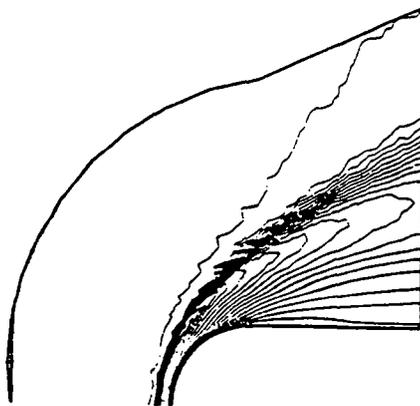
Figure 7: Isovaleurs du nombre de Mach. Ordre 2



Modèle de Sutherland

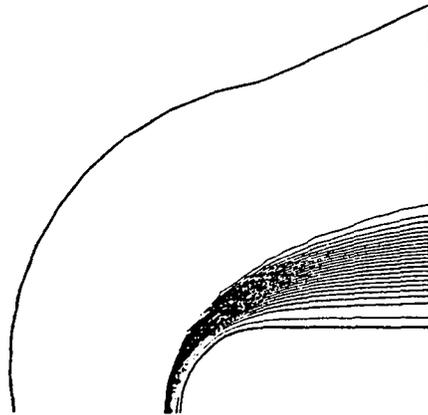


Modèle de Gnoffo

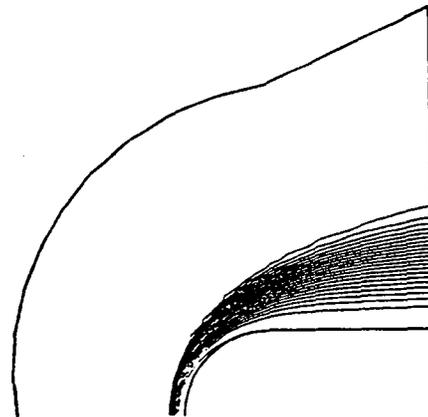


Modèle de Lennard-Jones

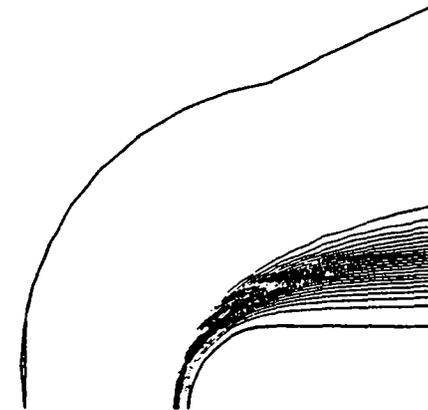
Figure 8: Isovaleurs de la température. Ordre 2



Modèle de Sutherland



Modèle de Gnoffo



Modèle de Lennard-Jones

Figure 9: Fraction massique de N. Ordre 2

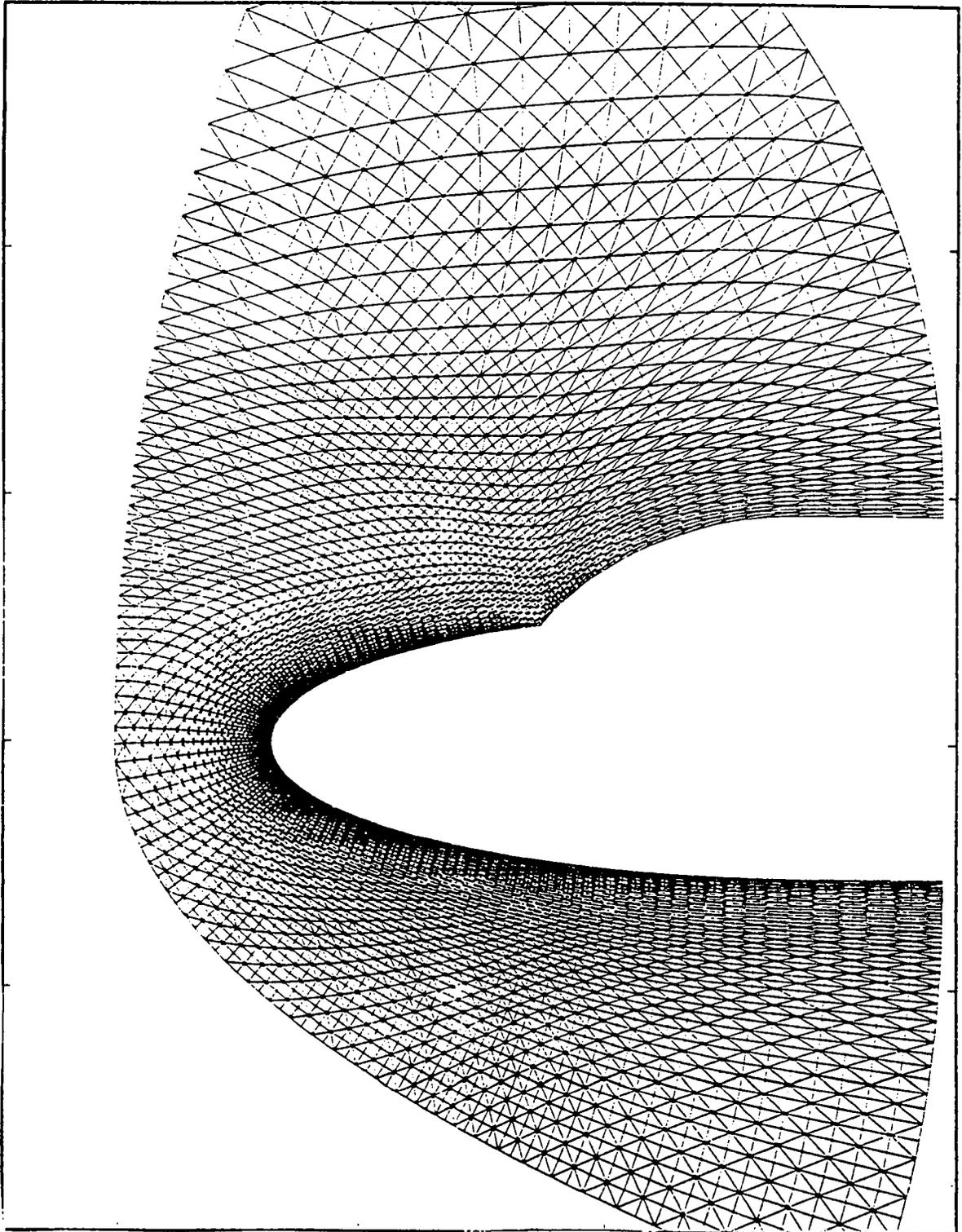
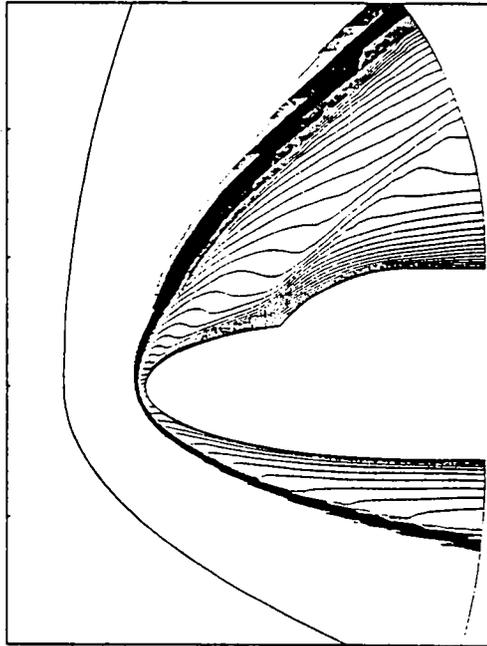
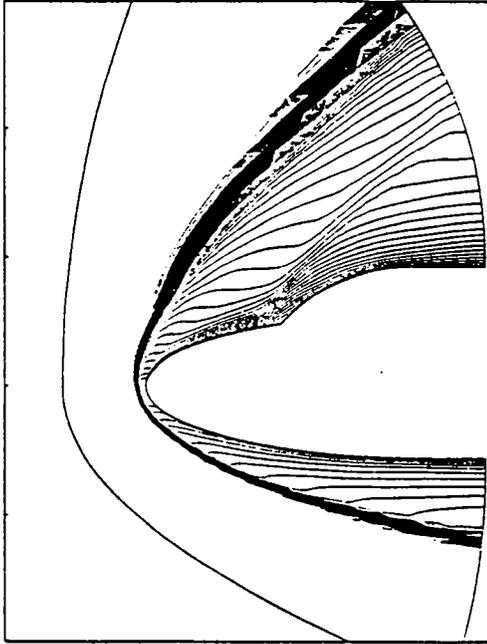


Figure 10: Double ellipse. Maillage (6050 points)

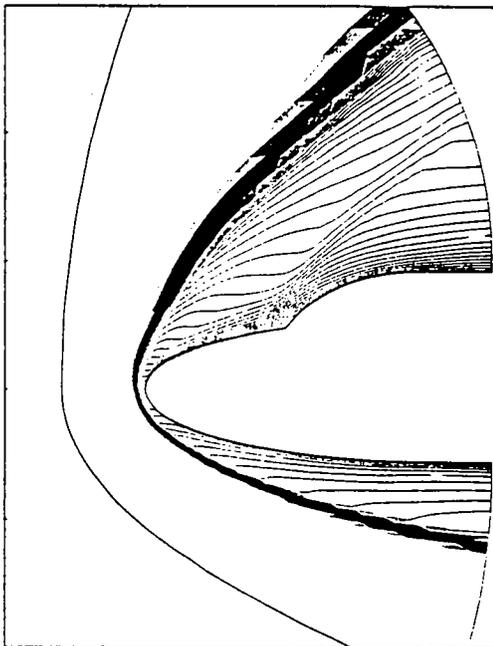


Modèle de Sutherland

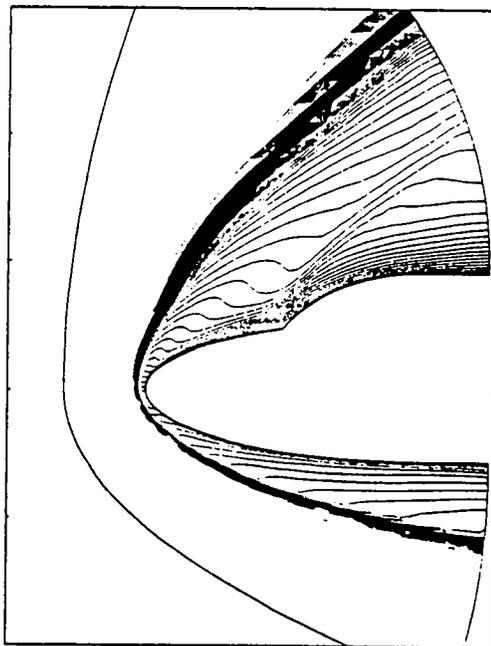


Modèle de Candler

Figure 11: Isovaleurs du nombre de Mach

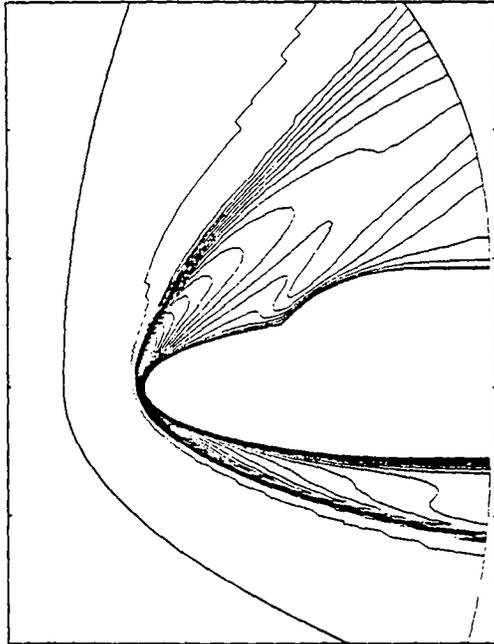


Modèle de Gnoffo

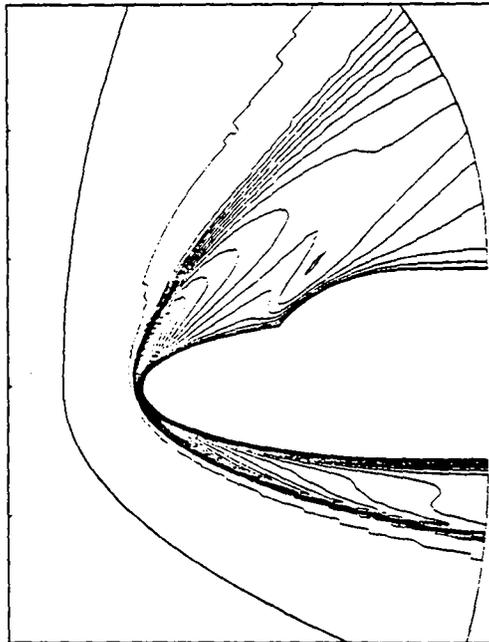


Modèle de Lennard-Jones

Figure 12: Isovaleurs du nombre de Mach

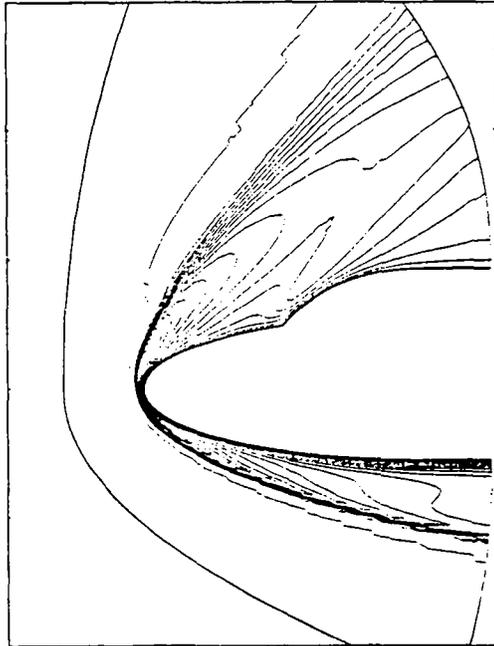


Modèle de Sutherland

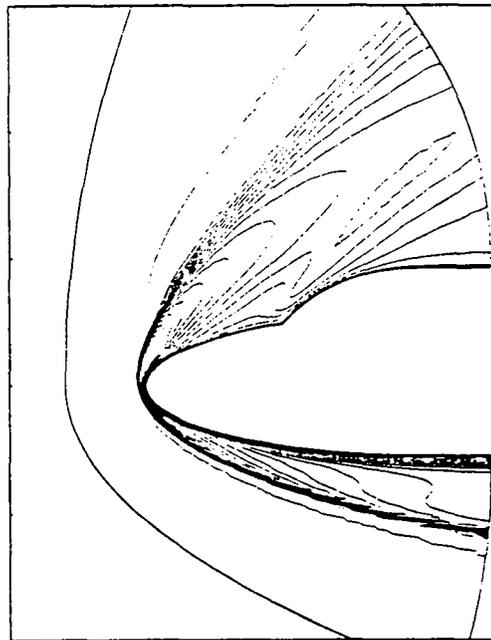


Modèle de Candler

Figure 13: Isovaleurs de la température



Modèle de Gnonfo



Modèle de Lennard-Jones

Figure 14: Isovaleurs de la température

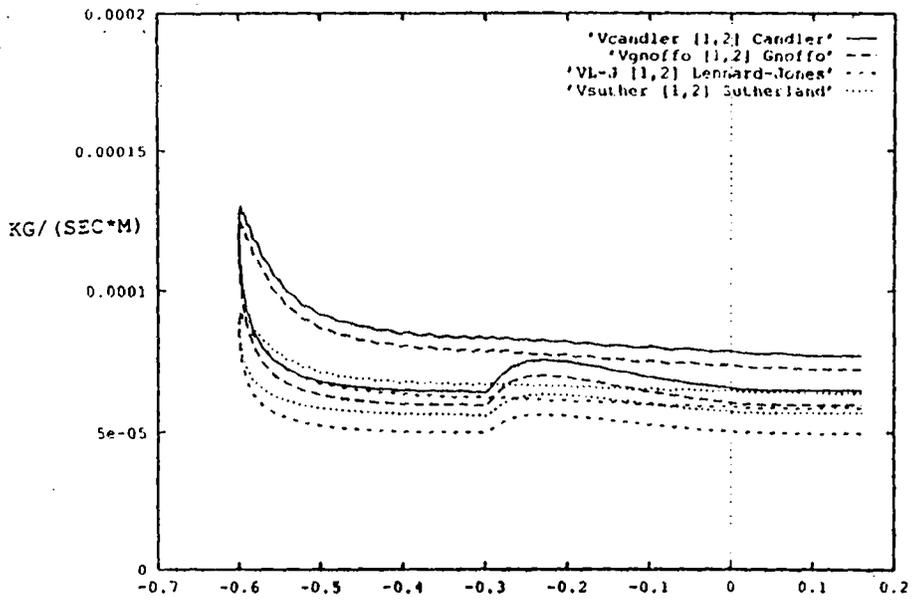


Figure 15: Coefficient de viscosité à la paroi

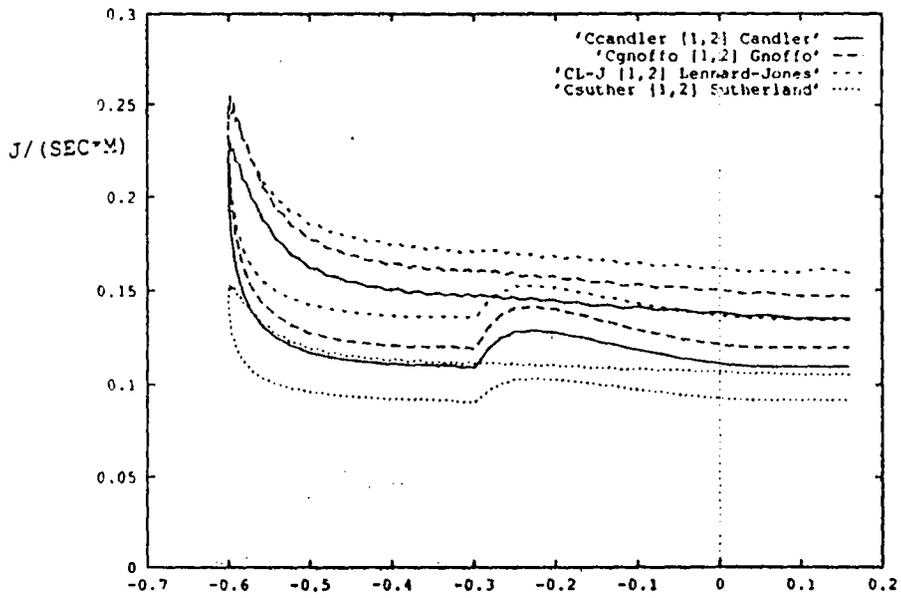


Figure 16: Coefficient de conductivité à la paroi

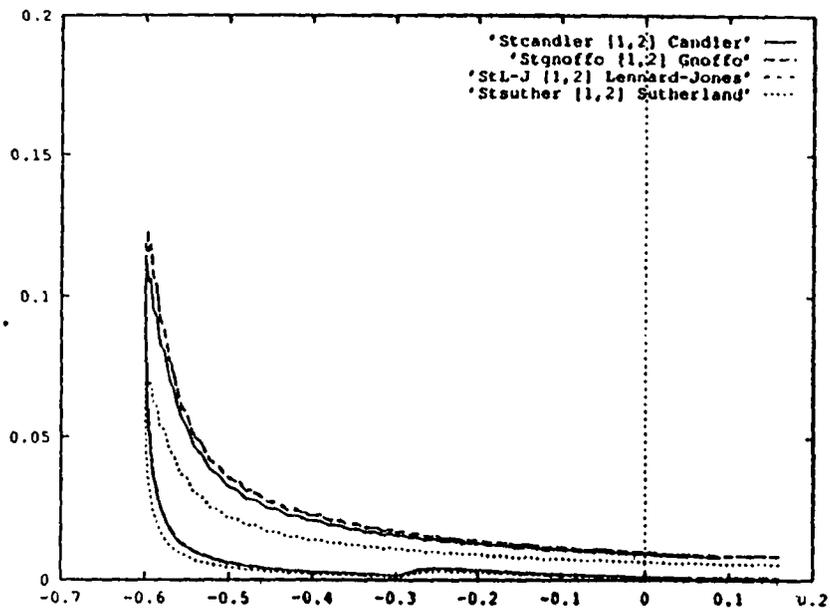


Figure 17: Nombre de Stanton à la paroi

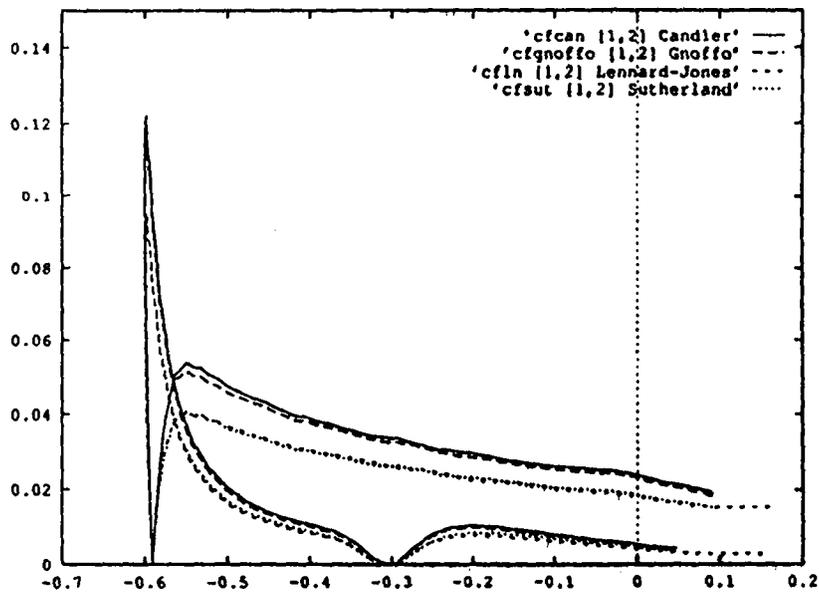
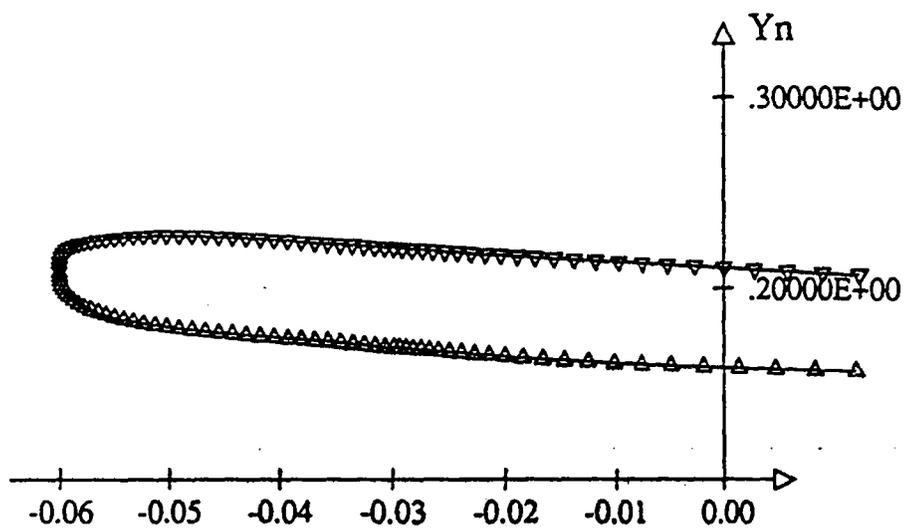
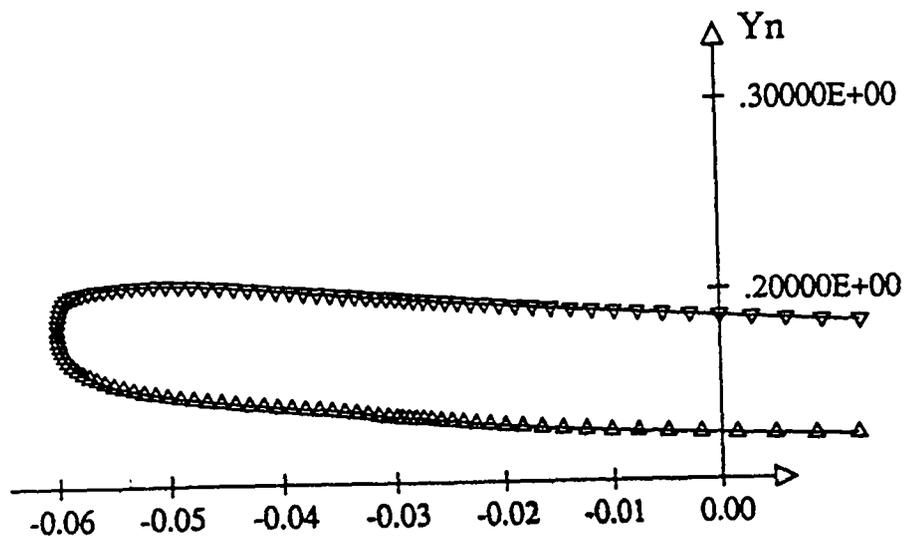


Figure 18: Coefficient de friction à la paroi

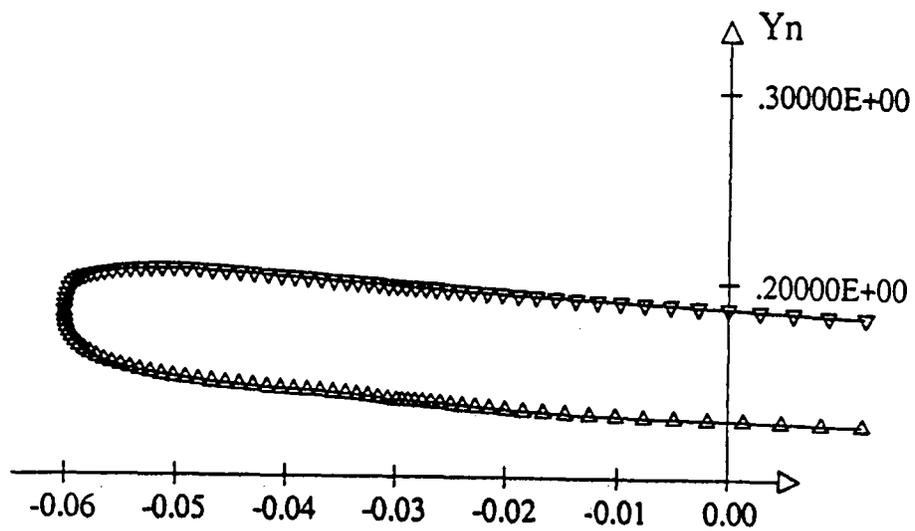


Modèle de Sutherland

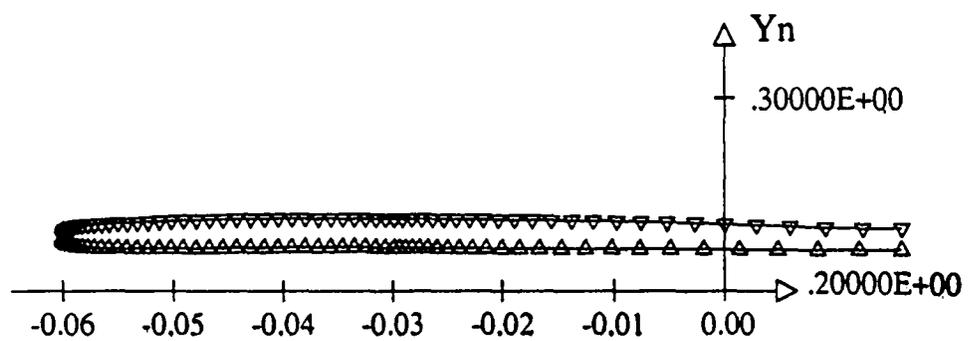


Modèle de Candler

Figure 19: Fraction massique de N à la paroi

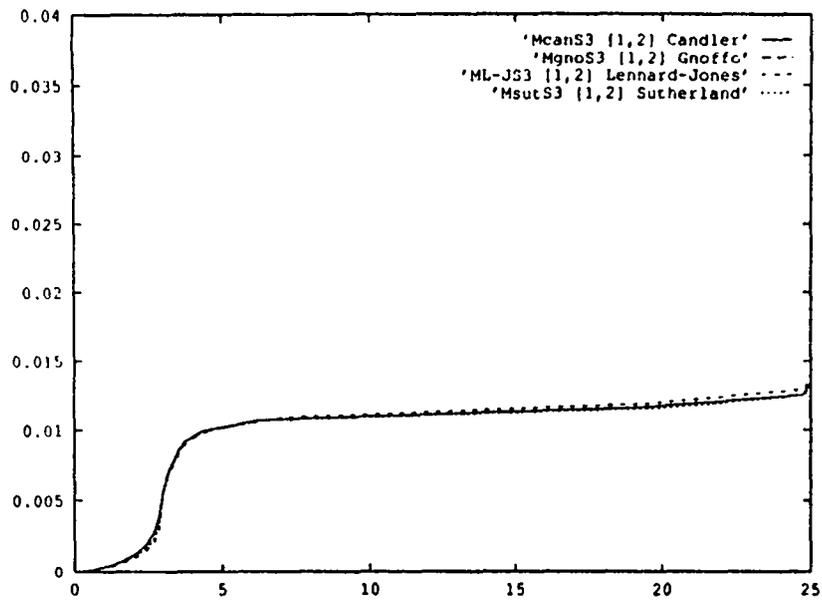


Modèle de Gnoffo



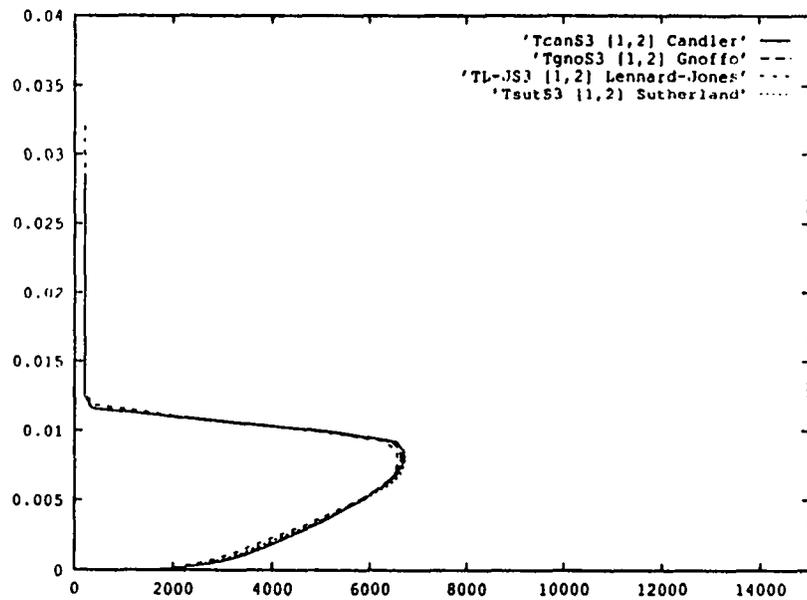
Modèle de Lennard-Jones

Figure 20: Fraction massique de N à la paroi



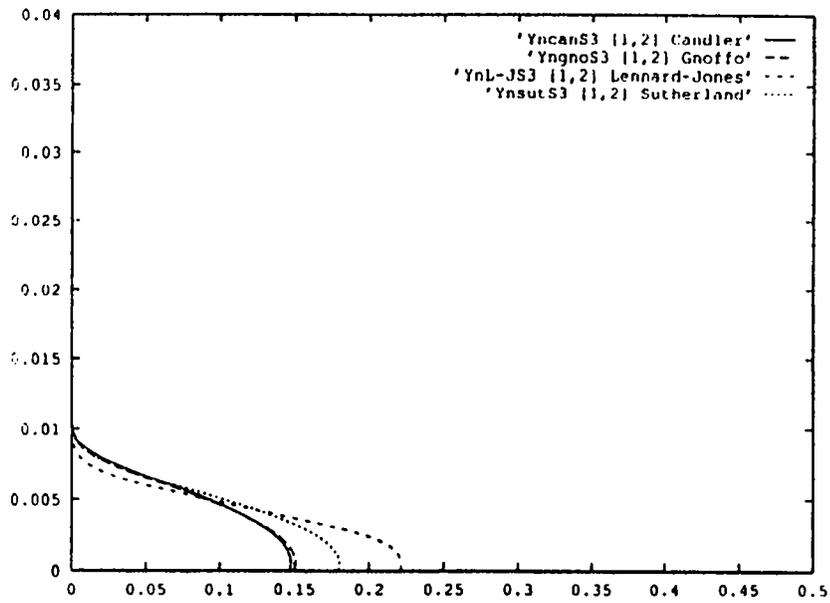
Section sur l'extrados, avant la cabine

Figure 21: Profils de nombre de Mach



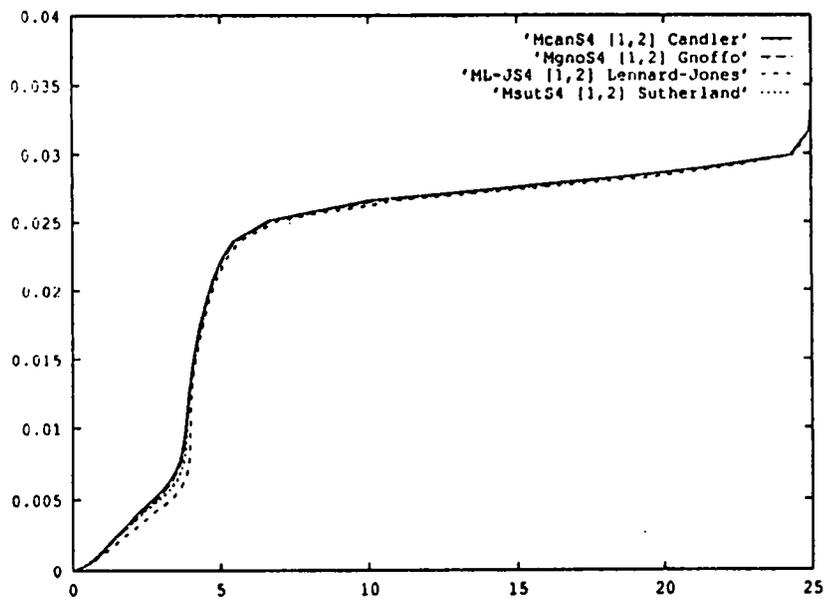
Section sur l'extrados, avant la cabine

Figure 22: Profils de température



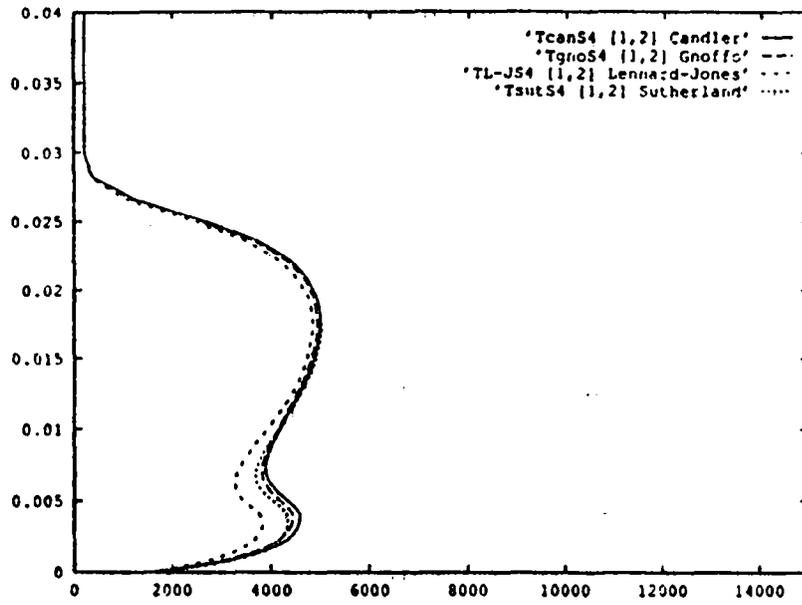
Section sur l'extrados, avant la cabine

Figure 23: Profils de fraction massique de N



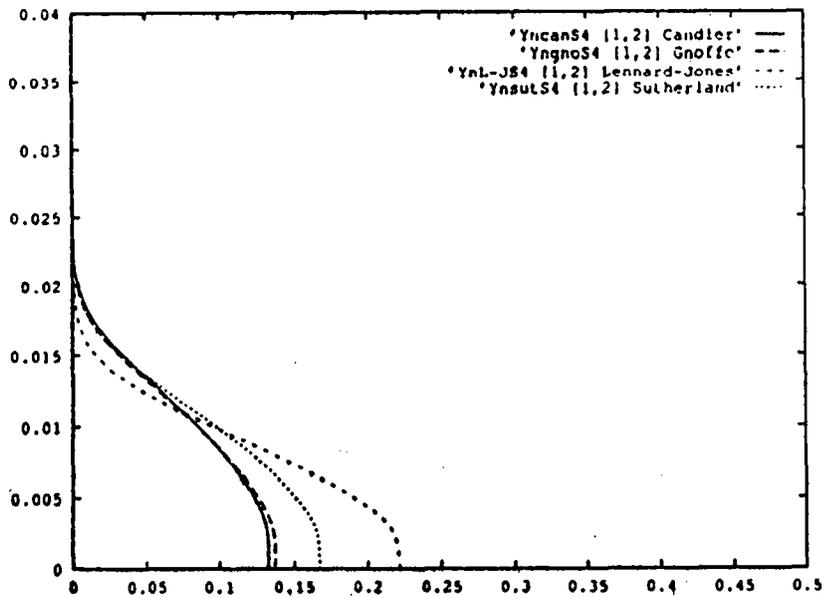
Section sur l'extrados, après la cabine

Figure 24: Profils de nombre de Mach



Section sur l'extrados, après la cabine

Figure 25: Profils de température



Section sur l'extrados, après la cabine

Figure 26: Profils de fraction massique de N

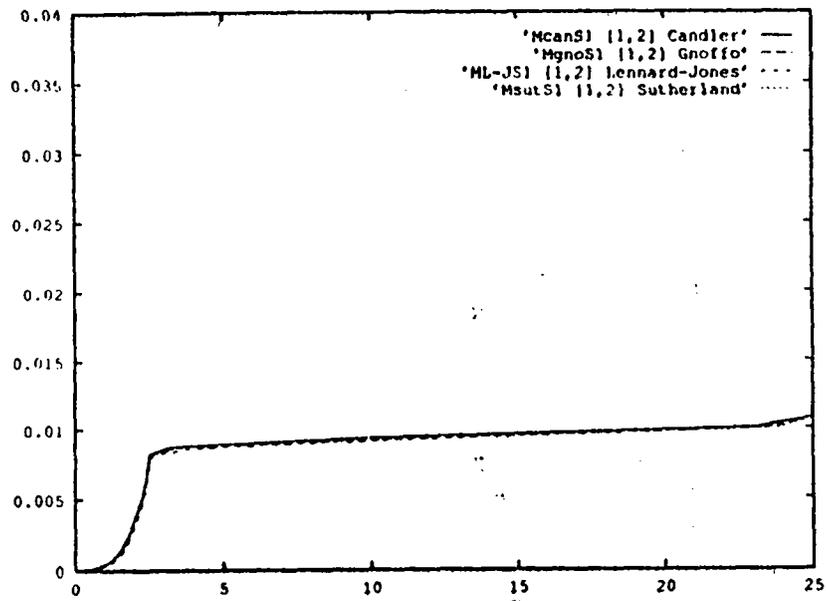


Figure 27: Profils de nombre de Mach. Section sur l'intrados

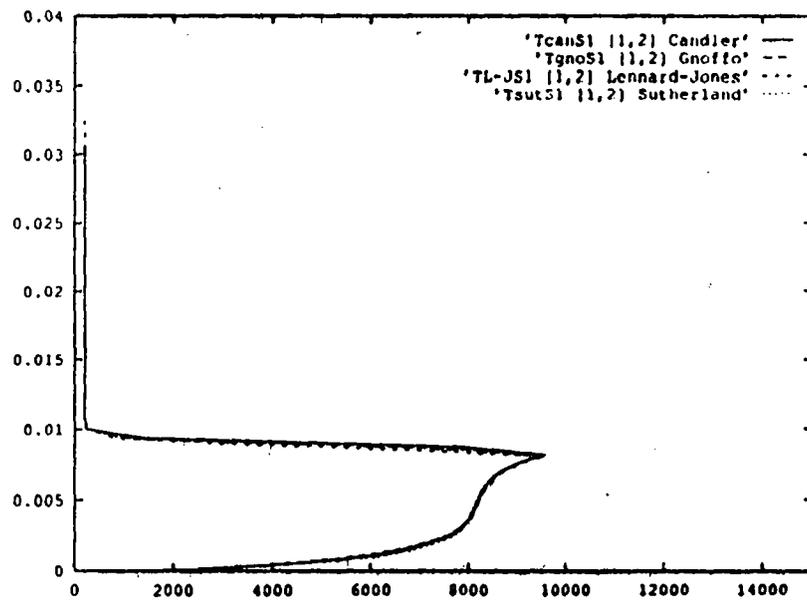


Figure 28: Profils de température. Section sur l'intrados

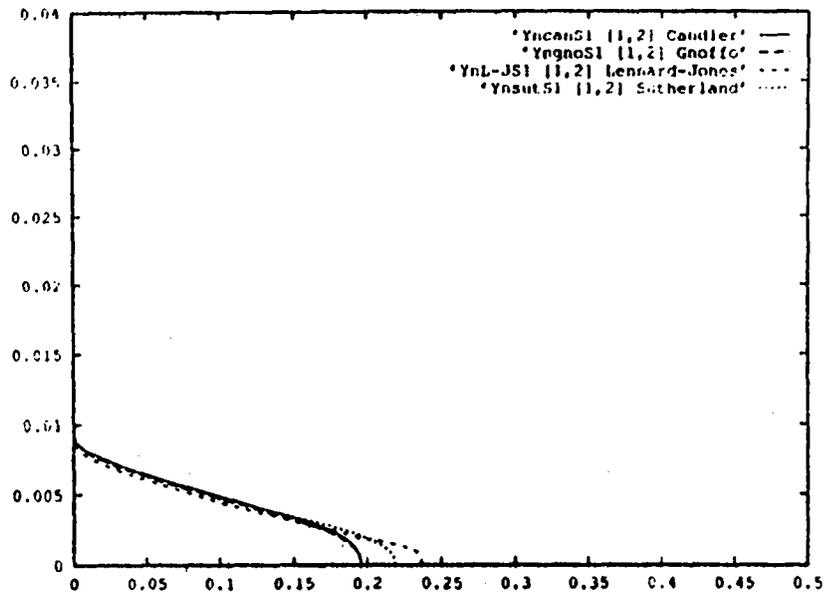


Figure 29: Profils de fraction massique de N.Section sur l'intrados

## Références

- [1] YOS J.M. "Transport Properties of Nitrogen, Hydrogen, Oxygen and Air to 30000 K", *Technical Memorial RAD-TM-63.7 Contract AF 33(616).7578, AVCO Corp., Mar. 22, 1963*
- [2] HIRSCHFELDER J.O., CURTISS C.F., BIRD R.B. "Molecular Theory of Gases and Liquids", *Wiley, New York, 1960*
- [3] WILKE C.R. "A Viscosity Equation for Gas Mixtures", *J. Chem. Physics, vol. 18, p. 517, 1950*
- [4] GLINSKY N., FEZOU 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*
- [5] GLINSKY N. "Simulation Numérique d'Écoulements Hypersoniques Reactifs Hors Equilibre Chimique", *Thèse, Université de Nice, Novembre 1990*
- [6] ZEL'DOVICH Y.B., RAIZER Y.P. "Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena". *Accademic Press*
- [7] PARK C. "On the Convergence of Chemically Reacting Flows", *AIAA Paper 85-0247, AIAA 23rd Aerospace Sciences Meeting, Reno/Nevada, January 14-17, 1985*
- [8] DESIDERI J.A., GLINSKY N., HETTENA E. "Hypersonic Reactive Flows Computation", *Computers and Fluids Journal, vol.18, No.2, pp. 151-182,1990*
- [9] CANDLER G. "The Computation of Weakly Ionized Hypersonic Flows in Thermo-Chemical Nonequilibrium". *Thesis, Stanford University, June 1988*
- [10] BLOTTNER F.G. "Finite Difference Methods of Solution of the Boundary-Layer Equations". *AIAA Journal, vol. 18, n. 2, p. 193, 1970*
- [11] GUPTA R.N., YOS J.M., THOMPSON R.A. "A Review of Reaction Rates and Thermodynamic and Transport Properties for the 11-Species Air Model for Chemical and Thermal Nonequilibrium Calculations to 30000 K", *NASA TM-101528, 1989*
- [12] GNOFFO P.A., GUPTA R.N., SHINN J.L. "Conservation Equations and Physicals Models for Hypersonic Air Flows in Thermal and Chemical Nonequilibrium", *NASA TP-2687, Feb. 1989*
- [13] MONCHICK L., MASON E.A. "Transport Properties of Polar Gases", *Journal of Chem. Phys., vol. 35, n. 5, p. 1676, Nov. 1961*
- [14] SALVETTI M.V., CICCOLI M.C., DESIDERI J.A. "Non-Equilibrium Inviscid and 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*

- [15] BOTTA N., CICCOLI M.C., DESIDERI J.A., FEZOU L., GLINSKY N., HETTENA E., OLIVIER C. "Reactive Flow Computations by Upwind Finite Elements" *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.
- [16] GUBERNATIS P. "Ecoulements Hypersoniques Dissipatifs: Modèles Physiques et Numériques. Application aux Ondes de choc et aux Tuyères bidimensionnelles" *Thèse, Université d'Aix-Marseille I, Juillet 1989*

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

**ISSN 0249-6399**