

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

2/95

وزارة التربية الوطنية

MINISTERE DE L'EDUCATION NATIONALE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT

Genie Mecanique

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE - المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

ETUDE DE LA RELAXATION
CHIMIQUE DERRIERE UN
CHOC FORT DETACHE

Proposé par :
M^r F. MEZAOUR

Etudié par :
M^r M. T. ATTOUCHI
M^r S. KHEDER

Dirigé par :
M^r B. BENKOUSSAS
M^r F. MEZAOUR

PROMOTION
Juillet 1995

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DES UNIVERSITES ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT
GENIE MECANIQUE

PROJET FIN D'ETUDE
THEME

المدسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

ETUDE DE LA RELAXATION
CHIMIQUE DERRIERE UN
CHOC FORT DETACHE

Proposé par :

Mr F.MEZAOUR

Etudié par :

Mr M.T.ATTOUCHI
Mr S.KHEDER

Dirigé par :

Mr B.BENKOUSSAS
Mr F.MEZAOUR

PROMOTION
JUILLET 1995

E.N.P 10, Avenue Hacen Badi EL HARRACH ALGER

Mémoire de Fin d'Etudes

Présenté

A l'Ecole Nationale Polytechnique
Au Département de Génie Mécanique

Par

MM. ATTOUCHI Mohamed Tarek
KHEDER Sofiane

Pour l'obtention du Diplôme d'Ingénieur d'état en Génie Mécanique

Thème

Etude de la Relaxation Chimique
derrière un choc fort détaché

soutenu publiquement le juillet 1994 devant le jury

MM.	Lorbi	(Président)
	Benkoussas	(Promoteur)
	F.Mezaour	(co-promoteur)
	Boudjema	(Examineur)

Promotion juillet 1995

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

((قَالُوا سُبْحَانَكَ لَا عِلْمَ لَنَا إِلَّا مَا عَلَّمْتَنَا إِنَّكَ أَنْتَ الْعَلِيمُ الْحَكِيمُ))

الآية ٣٢ من سورة البقرة

((يَرْفَعُ اللَّهُ الَّذِينَ ءَامَنُوا مِنْكُمْ وَالَّذِينَ أُوتُوا الْعِلْمَ دَرَجَاتٍ))

الآية ١١ من سورة المجادلة

((يَا مَعْشَرَ الْجِنِّ وَالْإِنسِ إِنَّ اسْتَطَعْتُمْ أَنْ تَنْفُذُوا مِنْ أَقْطَارِ

السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ فَانفُذُوا لَا تَنْفُذُونَ إِلَّا بِسُلْطَانٍ))

الآية ٢٢ من سورة الرحمن

L'Édicace

A mes très chers parents,

Pour tout les sacrifices consentis, sans lesquels ce travail
n'aurait pas vu le jour

A ma soeur regrettée Leïla,

A toute ma famille,

A mon meilleur ami Mohamed, auprès duquel j'ai trouvé entente et lié
amitié,

A toute la famille Attouchi,

A tous mes amis,

Puisse-t-ils trouver un humble témoignage de ma profonde
gratitude.

S.Kheder

.../...

A mes très chers parents,

Qui grâce à eux et leurs sacrifices j'arrive à ce niveau

A tous mes enseignements depuis mes études primaires,

A toute la nation musulmane,

je dédie ce travail.

M. Attouchi

Remerciements

Nous voudrions exprimer notre gratitude à notre co-promoteur *F. Mezaouer* pour son aide permanente et son encouragements qu'il nous a prodiguer durant tout ce travail.

Nous tenons aussi à exprimer nos remerciements les plus sincères à notre promoteur *Dr. Benkoussas* pour ses précieux conseils critiques.

Nos remerciements vont également à tous les enseignants qui ont contribué à notre formation, et à l'ensemble du personnel de la bibliothèque et du centre de calcul pour leur disponibilité et leur efficacité.

Que tous nos amis trouve ici l'expression de notre profonde gratitude pour leur soutien moral dont ils ont fait preuve à notre égard.

Nos remerciements s'adressent aussi à tous les membres du jury pour nous avoir honoré en acceptant de juger ce modeste travail.

Enfin, que tous ceux, qui de près ou de loin, ont participé à l'élaboration de ce travail trouvent ici l'expression de nos meilleurs remerciements.

الموضوع: دراسة الإسترخاء الكيميائي خلف صدمة قوية عمودية منفصلة

الملخص:

لقد درسنا مشكلة السريان المتفاعل الفائق السرعة واللزج ذي الإتجاه الواحد في حالة اللاتوازن الكيميائي، الذي يتمذج ظاهرتي التفكك والإسترخاء الكيميائي خلف صدمة قوية منفصلة، حيث نعتبر القيم الحركية للهواء خلف الصدمة ثابتة.

SUJET : *Etude de la relaxation chimique derrière un choc fort normal détaché*

RESUME :

On a étudié un problème d'écoulement monodimensionnel hypersonique réactif, non-visqueux en non équilibre chimique, qui modélise les phénomènes de dissociation et de relaxation chimique derrière un choc fort, normal, détaché, dans lequel les quantités aérodynamiques fixées aux valeurs qu'elles ont derrière le choc.

SUBJECT : *Study of the chemical relaxation behind a strong normal detached shock.*

ABSTRACT :

We have studied one-dimentionnal of non-equilibrium chemically reacting non-viscous flow, in hypersonic flow field, modeling the chemical dissociation and relaxation phenomena behind a detached strong normal shock, where aerodynamics quantities values are fixed behind the shock.

TABLES DES MATIERES

Introduction.....	2
I-Notion de Thermodynamique.....	6
I.1- Propriétés de l'air.....	7
I.1.1- Composition.....	7
I.1.2- Comportement de l'air à haute température.....	7
I.2- Les équations de dissociation.....	8
I.3- Les équations de conservations.....	12
I.3.1- Relation de base.....	12
I.3.2- Conservation de la masse.....	14
I.3.3- Conservation des espèces.....	14
I.4- La pression.....	16
I.5- La haute atmosphère.....	16
I.5.1- Atmosphère isotherme.....	16
I.5.2- Atmosphère Polytropique.....	17
I.6- Expression de l'énergie.....	18
I.6.1- Hypothèses et définitions.....	18
I.6.2- Energie de translation.....	19
I.6.3- Energie de rotation.....	20
I.6.4- Energie de vibration.....	20
I.6.5- Energie de formation.....	21
I.6.6- Energie totale.....	21
I.7- Elements d' Aérodynamique.....	25
I.7.1- Aérodynamique hypersonique.....	25
I.7.2- Phénomènes lié à l'écoulement à travers les chocs intenses.....	25

II- Notions de cinétique chimique.....	28
II.1- Rôle de la cinétique chimique.....	29
II.2- Vitesse d'une réaction.....	29
II.2.1- Vitesse totale.....	29
II.2.2- vitesse spécifique.....	30
II.2.3- Constante de vitesse.....	30
II.2.4- Degré d'avancement d'une réaction.....	30
II.3- Relation empirique d'Arrhenius.....	31
II.4- Détermination expérimentale de l'énergie d'activation.....	31
II.4.1- Définition.....	31
II.4.2- Linéarisation de la relation d'Arrhenius.....	32
III- La Relaxation chimique.....	34
III.1- Introduction.....	35
III.2- Les équations d'évaluation.....	35
III.2.1- La conservation de la masse chimique.....	35
III.2.2- L'équation de conservation de l'entropie.....	36
III.3- Propriétés du choc normal.....	38
III.3.1- Conditions à l'aval du choc.....	38
III.3.2- Calcul approximatif de la couche de choc.....	38
III.4- Description mathématique du modèle physique.....	42
III.4.1- Les équations.....	42
III.4.2- Les conditions au bord.....	43
III.4.3- Les conditions aux limites.....	44
III.5- Le calcul du termes sources.....	45
IV- Résolution du problème.....	51
IV.1- Résolution du problème par la méthode de Runge-Kutta.....	51

IV.2- Résolution du problème par des méthodes pseudo-instationnaire.....	55
IV.2.1- Méthode explicite.....	55
IV.2.1.a- Schéma d'ordre 1.....	58
IV.2.1.b- Schéma d'ordre 2.....	58
IV.2.2- Méthodes implicite.....	60
IV.3- Résultats et commentaires.....	63
IV.3.1- Introduction.....	63
IV.3.2- Méthode de Runge-Kutta.....	63
IV.3.3- Méthode Explicite.....	66
IV.3.4- Méthode Implicite.....	67
IV.3.5- Conclusion.....	67

Conclusion

Annexes

Annexe A : Détermination de la vitesse de réaction

Annexe B : Le modèle de Rakich et al

Bibliographie

NOTATION

- ρ : Masse volumique (kg/m³).
 V : Vitesse (m/s).
 p : Pression (N/m²).
 M_{∞} : Nombre de Mach en amont du choc.
 T : Température (K).
 t : Temps.
 Y_i : Fraction massique de l'espèce i .
 q : Concentration (mol./kg).
 h_i^0 : Enthalpie de formation par unité de masse de l'espèce i (J/kg).
 H : Enthalpie totale par unité de masse (J/kg).
 m : Masse.
 h : Enthalpie par unité de masse (pas d'espace)
 \bar{m}, M : Masse molaire.
 R_0 : Constante universelle des gaz 8.314 (J/mol. K).
 R : Constante spécifique des gaz (J/kg. K).
 γ : Rapport des chaleurs spécifiques.
 N : Nombre d'Avogadro.
 v : Volume de contrôle.
 n : Nombre de mole (ou indice de temps).
 W : Vitesse spécifique de la réaction.
 $\bar{\psi}$: Vitesse de la réaction.
 x_i : Fraction molaire.
 N : Nombre d'atome.

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

INTRODUCTION

INTRODUCTION :

C'est dans les années 50, avec les premiers projets spatiaux, que démarre la recherche dans le domaine de l'ypersonique.

Une bonne prédiction de l'écoulement autour de l'engin est indispensable au constructeur pour assurer sa stabilité et une bonne protection thermique.

De nombreux modèles physiques ont été établis à cette époque, mais leurs complexité et l'insuffisance des méthodes expérimentales rendirent les recherches difficiles, il est en effet, impossible de reproduire en soufflerie une rentrée atmosphérique [24].

Il faudra attendre les années 70 et le projet de Navette spatiale Américaine pour que redémarrent les recherches en hypersoniques l'arrivée d'ordinateurs puissants rend enfin possible l'utilisation des méthodes Numériques. La mécanique des fluides Numériques fait son apparition et les recherches dans ce domaine ne cessent de se développer depuis cette date. C'est ainsi que n'acquirent de domaines nouveaux tel que " hypervelocity aerodynamics " où l'écoulement est à la fois hypersonique et grande vitesse [28].

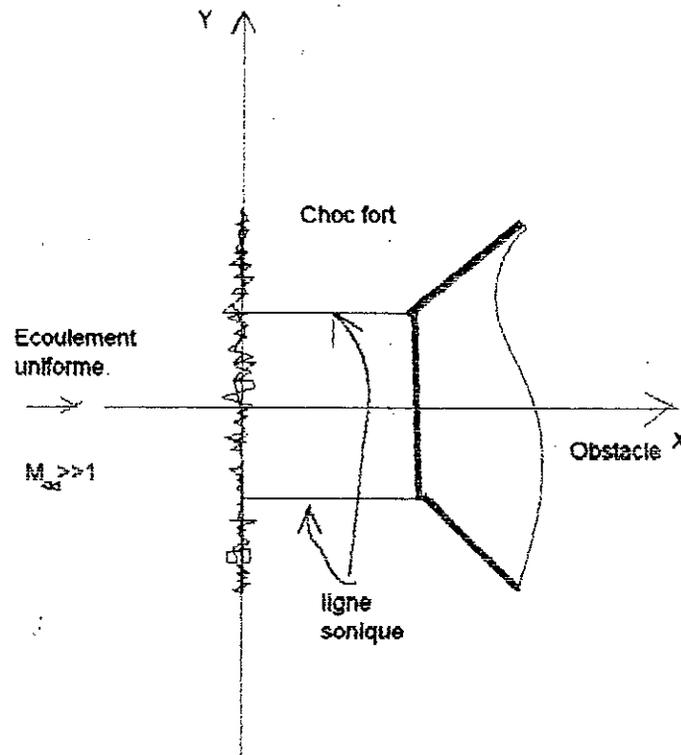
Ce travail est motivé par la nécessité de faire une introduction à la simulation des phases critiques d'entrée dans l'atmosphère des Navettes spatiales.

La Navette spatiale atteint la couche mésosphère à une vitesse hypersonique pour laquelle le nombre de Mach.

$$M_{\infty} = \frac{V_{\infty}}{C_{\infty}} \gg 1$$

(V_{∞} : Vitesse relative air/engin ; c_{∞} : Vitesse locale du son) peut varier de 15 à 25.

Par conséquent, il se produit à l'amont du corps un choc détaché très fort causant d'importantes variations de quantités physiques de l'air ; l'écoulement est ensuite ralenti jusqu'à des vitesses subsoniques dans la région du Nez.



A l'amont du choc, l'écoulement est uniforme, la température est faible et l'air est assimilé à être un mélange constant (isotrope) de 79% d'Azote et 21% d'Oxygène. Immédiatement derrière le choc, la température est beaucoup plus élevée. Pour un gaz parfait inerte, la température T_s est constante le long d'une ligne de courant et donnée par la formule.

$$\frac{T_s}{T_\infty} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} \cdot M_\infty^2$$

Où γ est le rapport des chaleurs spécifiques ($\gamma = 1,4$ pour l'air) cette température est également celle du point d'arrêt (stagnation point).

Ainsi par exemple, pour $T_\infty = 232$ °K et $M_\infty = 15$, la température au point d'arrêt est $T_s \cong 10600$ °K, il est donc évident que l'hypothèse d'un gaz inerte n'est pas valable [1]. Bien avant que cette température T_s soit atteinte, les molécules seront dissociées provoquant une baisse importante de la température, puisque les réactions de dissociations sont endothermiques. Ainsi pour ces raisons, une simulation pertinente d'écoulements hypersoniques décrivant avec précision les champs de température (données essentielles pour le constructeur), doit tenir compte des phénomènes de dissociation chimique.

Ce type d'écoulement (même sans dissociation) est complexe, en ce qui nous concerne, on résoud un problème chimique derrière un choc détaché, où les quantités Aérodynamiques de vitesse et densité sont considérées constantes. En effet elle nous permet d'identifier les échelles caractéristiques de temps et de longueur qui entre jeu, applicable au cas bidimensionnel.

Le choc constitue le bord du domaine de calcul. Les conditions à l'aval sont déterminées par les conditions de saut ou relation de Rankine-Hugoniot.

Les relations chimiques derrière le choc dépendent de nombreux facteurs. L'altitude, la vitesse ainsi que la géométrie ont une grande influence sur l'écoulement à l'aval du choc (pression, masse volumique, température...). Le processus de relaxation est le résultat des collisions moléculaires. Cependant les collisions nécessitent un certain temps.

Lorsque toutes les collisions ont le temps de se produire dans l'élément fluide on dit que le système est à l'équilibre. Le plus souvent, l'élément de fluide traverse la couche de choc trop rapidement pour que les collisions puissent toutes se produire et le gaz ne peut atteindre l'état d'équilibre. Il est alors hors-équilibre.

Afin de situer le présent travail, nous commençons par introduire des notions fondamentales de thermodynamique, d'aérodynamique, de gazodynamique et de cinétique-chimique.

Ensuite, on établira une description mathématique du modèle physique.

Enfin on présentera les résultats obtenus commentés.

CHAPITRE I :

NOTIONS DE THERMODYNAMIQUE
ET D'AERODYNAMIQUE

- I.1- Propriété de l'air :
 - I.1.1 - composition
 - I.1.2 - comportement de l'air à haute température
- I.2 - Les équations de dissociation
- I.3- Les équations de conservation
 - I.3.1- Relations de base
 - I.3.2- Conservation de la masse
 - I.3.3- Conservation des espèces.
- I.4- La pression
- I.5- La haute atmosphère
 - I.5.1- Atmosphère isotherme
 - I.5.2- Atmosphère Polytropique
- I.6- Expression de l'énergie
 - I.6.1- Hypothèses et définitions
 - I.6.2- Energie de translation
 - I.6.3- Energie de rotation
 - I.6.4- Energie de vibration
 - I.6.5- Energie de formation
 - I.6.6- Energie totale
- I.7- Eléments Aérodynamiques
 - I.7.1- Aérodynamique hypersonique
 - I.7.2- Phénomènes à travers les chocs intenses

I.1- Propriétés de l'air :

I.1.1- Composition :

L'air qui nous entoure est un mélange défini par sa composition, qui à l'équilibre est la même dans toute l'étendue de la phase gazeuse (l'air isotrope). Dans les conditions normales de température, il est constitué essentiellement de 78.03% d'azote, 20.93% d'oxygène diatomiques, 0.932% d'argon et moins de 0.1% de (CO₂, Ne, He, Kr, H₂, Xe) [29]. Pour une étude simple, on prend 79% de N₂ et 21% de O₂.

I.1.2- Comportement de l'air à haute température :

L'air n'est pas inerte, et sa composition dépend de sa température. Dès que celle-ci dépasse 2500°K, la dissociation, l'ionisation ont toutes les deux tendance à être très importantes dans un milieu comme la haute atmosphère, les espèces diatomiques présentes, O₂ et N₂ réagissent. Il se produit alors des dissociations, des recombinaisons et de l'ionisation qui vont transformer la composition initiale de l'air en un mélange de nombreux espèces : N₂, O₂, NO, N, O, NO⁺, O⁺, N⁺, O⁻, N⁻, e⁻, ... dont la proportion est fonction de la température. Si on examine la figure [2] donnant la composition de l'air à l'équilibre en fonction de la température, on constate que dans l'intervalle de température, qui nous concernant, les espèces ionisées sont très peu présentes, ainsi, comme pour le type d'écoulement qui l'on étudie, la proportion de NO est souvent faible.

Dans notre étude nous sommes surtout intéressés, par les aspects énergétique, c'est la raison pour laquelle nous ne prendrons pas en considération le phénomène d'ionisation. Dans tout ce travail, nous considérons alors, un mélange de cinq espèces : O, N, NO, O₂, et N₂ indicées de 1 à 5 dans cette ordre, et on suppose que le mélange et ses constituants sont des gaz parfait [5].

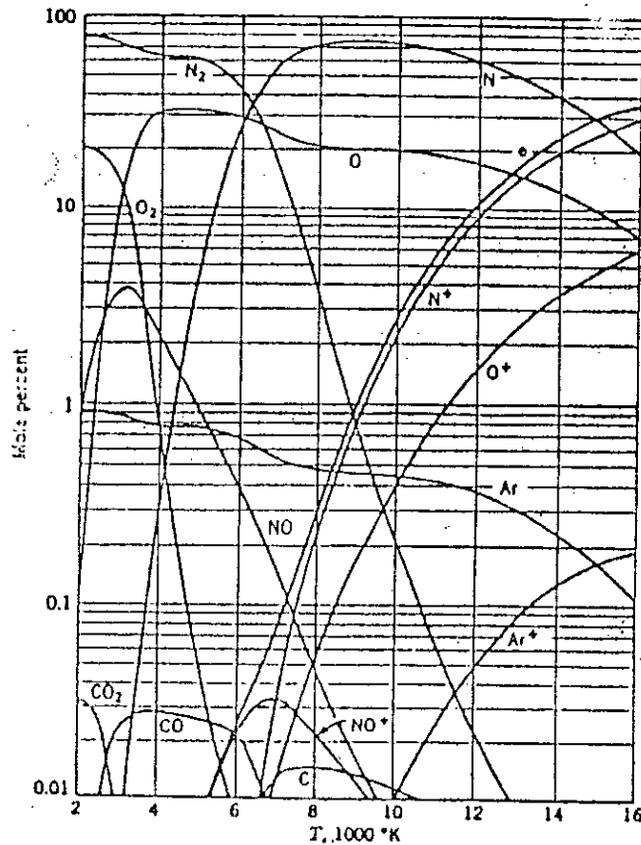
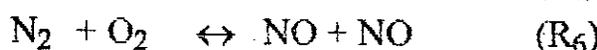
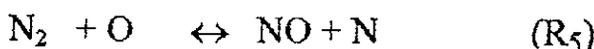
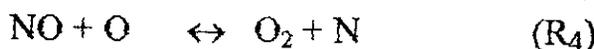
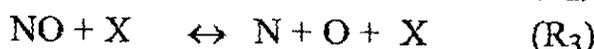
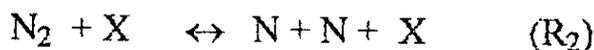
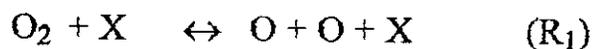


fig 1.2- Composition de l'air à l'équilibre ($\rho = 10^{-2} atm$)
(d'après Hilsenrath, Klein et Woolley, 1959)

1.2- Les équations de dissociation :

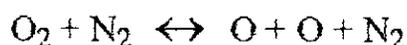
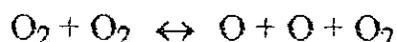
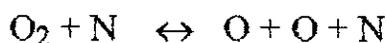
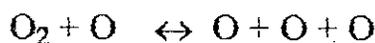
Compte tenu des espèces considérées, nous allons étudier un modèle composé de 18 réactions réversibles. Ce système le plus complet que l'on puisse écrire pour ce mélange a été proposé par [ZEL'DOVICH] dans les années 60.

ce modèle s'écrit



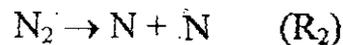
X représente un facteur de collision qui peut être n'importe laquelle des cinq espèces présentes.

Par exemple (R₁) peut s'écrire :

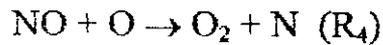


Les réactions sont écrites de telles sorte que les réactions directes soient endothermiques.

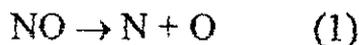
Les trois premières équations (R₁), (R₂) et (R₃), sont des réactions de dissociation dans le sens directe en présence d'un catalyseur X, ce sont celles que l'on peut utilisées dans un modèle de chimie à l'équilibre (c'est à dire:il n'est pas le siège de transformation moléculaire, par exemple pas de réactions chimique[21] ou encore, les collisions ont eu le temps de se produire). Les deux suivantes (R₄) et (R₅) sont des réactions de réarrangement bimoléculaire impliquant NO, elles permettent la création d'azote atomique N plus facilement qu'avec la réaction de dissociation bimoléculaire directe (R₂) car elle nécessite moins d'énergie comme nous montrons ci-dessous en utilisant la loi de Hess et la table 3 donnée ultérieurement :



$$\Delta H_{\text{R}_2} = 2 h_{f_N}^0 = 67.52 \cdot 10^6 \text{ j/kg.}$$

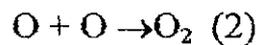


$$\Delta H_{\text{R}_4} = \Delta H_1 + \Delta H_2$$



$$\Delta H_1 = h_{f_N}^0 + h_{f_O}^0 - h_{f_{\text{NO}}}^0$$

$$\Delta H_1 = 46.347 \cdot 10^6 \text{ J/kg.}$$



$$\Delta H_2 = h_{f_{\text{O}_2}}^0 - 2 h_{f_O}^0$$

$$\Delta H_2 = - 31.15 \cdot 10^6 \text{ j/kg.}$$

Alors

$$\Delta H_{\text{R}_4} = 15.197 \cdot 10^6 \text{ j/kg}$$

On constate que $\Delta H_{\text{R}_4} < \Delta H_{\text{R}_2}$

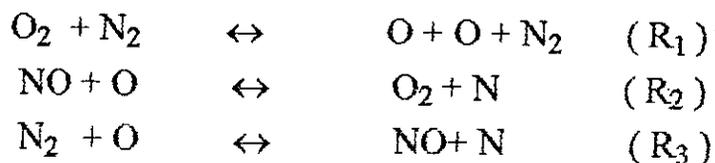
La dernière réaction (R_6) est la dissociation directe la plus importante pour la formation de NO dans l'air. Notons que la réaction (R_6) peut être obtenue par l'addition de (R_4) et (R_5).

On peut noter que dans ce système, seulement 3 des 18 réactions mises en jeu sont indépendantes.

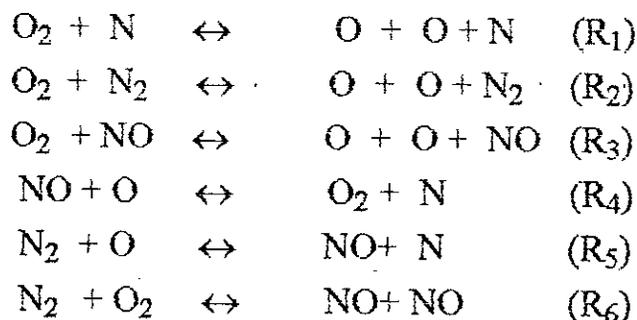
Dans le cas d'un modèle de chimie en non-équilibre toutes les réactions élémentaires doivent être prises en compte. En effet, contrairement à un modèle de chimie à l'équilibre, les réactions vont mettre un certain temps pour ce produire et

il est donc nécessaire de pouvoir suivre le mécanisme de la réaction et pas seulement d'en connaître le bilan.

Il est possible à partir de ce système complet d'extraire deux systèmes simplifiés à 3 et 6 réactions qui en étant moins coûteux à mettre en oeuvre peuvent permettre une étude préliminaire. Le modèle à 3 réactions s'écrit :



et le modèle à 6 réactions :



La production d'espèces à partir de O_2 et N_2 est endothermique ; les réactions vont donc provoquer une baisse importante de la température par rapport au cas d'un gaz figé (le gaz passe si rapidement qu'aucun processus chimique n'a le temps de s'amorcer) c'est à dire un gaz dans lequel O_2 et N_2 ne réagiraient pas.

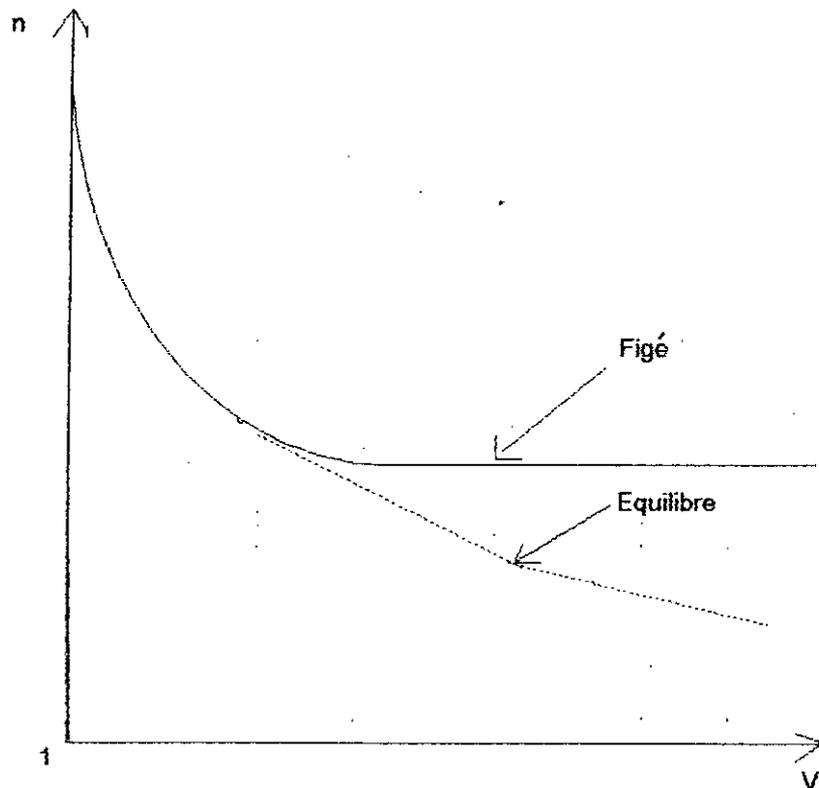


fig I-3

n : lié au taux de dissociation (nombre de mole)

I.3- Les équations de conservation :

I.3.1- Relations de bases :

On définit la loi qui régit les gaz parfaits par l'équation d'état :

$$P = \rho RT \quad (I-1)$$

Où P : la pression, ρ : la masse volumique

R : constante spécifique du gaz, T : température.
et le nombre de mole n : définie par

$$n = \frac{m}{M} \quad (I-2)$$

m : masse du gaz , M : masse molaire.

On définit encore la constante d'un gaz parfait par l'unité de masse par

$$R = \frac{R_0}{M} \quad (I-3)$$

R_0 : constante molaire des gaz parfait

Pour un mélange donné par sa composition en masse, les fractions massiques des différents espèces ; est défini par :

$$Y_i = \frac{m_i}{m} = \frac{\rho_i}{\rho} \quad (I-4)$$

Où m_i est la masse de l'espèce i contenue dans un volume de contrôle ν et m est la masse du mélange pour ce même volume.

ρ_i : la masse volumique de l'espèce i.

Si M_i est la masse molaire de l'espèce i, le nombre de mole n_i de l'espèce est donné par la relation :

$$n_i = \frac{m_i}{M_i} \quad (I-5)$$

et le nombre de mole total :

$$n = \sum n_i \quad (I-6)$$

On peut ainsi définir la composition du mélange par les valeurs des fractions molaires x_i de chaque espèce.

$$x_i = \frac{n_i}{n} = \frac{P_i}{P} \quad (I-7)$$

P_i : Pression partielle de l'espèce i .
avec évidemment :

$$\sum x_i = 1 \quad (I-8)$$

et

$$\sum P_i = P \quad (I-9)$$

On définit aussi

$$M = \sum x_i M_i \quad (I-10)$$

et

$$R_i = \frac{R_0}{M_i} \quad (I-11)$$

R_i : constante spécifique de l'espèce i .

I.3.2- Conservation de la masse :

La première équation de conservation concernant les fractions massiques :

$$\sum_{i=1}^5 Y_i = 1 \quad (I-12)$$

I.3.3- Conservation des espèces :

Si l'on néglige la diffusion moléculaire, le nombre d'atome d'Azote N_N présent sous forme de N_2 , N ou NO dans un élément fluide que l'on suit dans son mouvement est constant dans le temps et il en est de même pour le nombre d'atome d'oxygène N_O présents sous forme de O_2 , O ou NO .

On se placera alors, dans le cas de modèles pour lesquels la proportion d'atomes d'oxygène O et d'Azote N monoatomique est constante pour un volume de contrôle, cette proportion est celle du gaz non dissocié. Ainsi le rapport $\frac{N_N}{N_O}$ est uniforme en espace et en temps et vaut $\frac{79}{21}$ comme dans le cas d'un gaz inerte. Le nombre d'atome N est défini par :

$$N = n \cdot N \quad (I-13)$$

N est le nombre d'Avogadro.
A partir de (I-6) et (I-13), on aura :

$$N_O = n_{O_2} \cdot 2 \cdot N + n_O N + n_{NO} N$$

Introduisant (I-5):

$$N_O = \frac{m_{O_2}}{M_{O_2}} 2 N + \frac{m_O}{M_O} N + \frac{m_{NO}}{M_{NO}} N$$

$$(I-4) \Rightarrow N_O = \frac{Y_{O_2} \cdot m}{M_{O_2}} 2 N + \frac{Y_O \cdot m}{M_O} N + \frac{Y_{NO} \cdot m}{M_{NO}} N$$

de même façon on obtient :

$$N_N = \frac{Y_{N_2} \cdot m}{M_{N_2}} 2 N + \frac{Y_N \cdot m}{M_N} N + \frac{Y_{NO} \cdot m}{M_{NO}} N$$

utilisons le rapport $\frac{N_N}{N_O}$, on obtient une seconde équation de conservation :

$$\frac{\frac{Y_{N_2}}{M_{N_2}} + \frac{Y_N}{M_N} + \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}}{\frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} + \frac{Y_O}{M_O} + \frac{Y_{NO}}{M_{NO}}} = \frac{79}{21} \quad (I-14)$$

I.4. La pression :

Le gaz étudié est un mélange de gaz parfait donc chaque composant vérifie la loi d'état des gaz parfait :

$$P_i = \rho_i R_i T \quad (I-15)$$

La pression du mélange est obtenue en appliquant la loi de Dalton aux pressions partielles qu'on rappelle brièvement : chaque constituant se comporte comme s'il occupait seul le volume entier du mélange à la température de ce dernier.

$$P = \rho R_0 T \sum_{i=1}^5 \frac{Y_i}{M_i} \quad (I-16)$$

I.5- Haute atmosphère :

I.5.1 - l'atmosphère isotherme :

Pour les altitudes Z_1 et Z_2 , le rapport des pressions P_1 et P_2 est donné par

$$\frac{P_2}{P_1} = e^{\frac{-g(Z_2 - Z_1)}{RT}} \quad (i-17)$$

Où g champ de gravité. De même le rapport des densités

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = e^{-\frac{g \cdot (Z_2 - Z_1)}{R \cdot T}} \quad (\text{I-18})$$

I.5.2- Atmosphère Polytropique :

On obtient une première expression :

$$Z_2 - Z_1 = \frac{n}{n-1} \cdot \frac{R \cdot T_1}{g} \left[1 - \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n-1}{n}} \right] \quad (\text{I-19})$$

$$\frac{P_2}{P_1} = \left[1 - g \cdot \frac{n-1}{n} \cdot \frac{Z_2 - Z_1}{R T_1} \right] \quad (\text{I-20})$$

Où n est un coefficient polytropique.
et une deuxième expression :

$$\frac{T_2}{T_1} = \left[1 - \frac{n-1}{n} \cdot \frac{g}{R \cdot T} (Z_2 - Z_1) \right] \quad (\text{I-21})$$

et

$$\frac{T_2 - T_1}{Z_2 - Z_1} = -g \cdot \frac{n-1}{n \cdot R} \quad (\text{I-22})$$

dans le tableau suivant on résume les propriétés atmosphériques des différentes altitudes.

Z (km)	n	g(m/s ²)	Type d'atmosphère
0-11	1.235	9.790	Polytropique
11-20	-	9.759	Isotherme
20-32	0.972	9.727	Polytropique
32-47	0.924	9.685	Polytropique
47-52	-	9.654	Isotherme
52-61	1.063	9.633	Polytropique
61-79	1.136	9.592	Polytropique
79- 88.743	-	9.549	Isotherme

Tableau 1 : définition des propriétés de l'atmosphère standard [19]

1.6- L'expression de l'énergie :

1.6.1- Hypothèses et définitions :

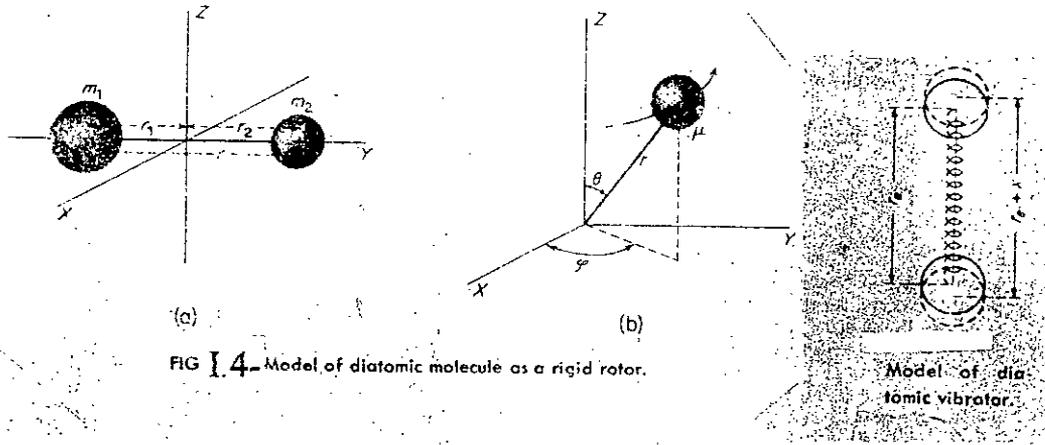
Afin de décrire le gaz avec précision, il convient d'étudier le gaz de point de vue microscopie.

☞ l'énergie interne du gaz est l'énergie cinétique des molécules qui le constituent (translation, rotation, vibration...).

On l'appelle encore énergie d'agitation thermique.

☞ la position d'une molécule dans l'espace est déterminée par la donnée d'un certain nombre de paramètre appelé degrés de liberté.

☞ le gaz est composé des molécules monoatomiques qui se déplacent librement dans l'espace selon trois degrés de liberté (translation uniquement) et des molécules diatomiques qui étant composées de deux atomes liés entre eux par une liaison covalente, possède deux degrés de liberté supplémentaire pour la rotation soit cinq degrés de liberté en tous, de plus, ces derniers peuvent vibrer autour de leur centre de gravité voir la figure ci-dessous.



☞. une molécule monoatomique n'a qu'une dimension très réduite (celle d'un atome), ses moments d'inertie sont faibles, de sorte que, pour être notables, les énergies cinétiques de rotation devraient correspondre à des vitesses de rotation considérables [27].

☞. pour les gaz monoatomiques, l'énergie cinétique serait alors seulement composée de l'énergie cinétique de translation. Pour les molécules, plus compliquées, l'énergie cinétique se compose de l'énergie de translation, plus une certaine énergie de rotation.

☞. le théorème de l'équipartition de l'énergie, c'est à dire que l'énergie soit répartie également entre tous les degrés de liberté possible, nous permet de savoir quelle est la part d'énergie qui se trouve sous forme d'énergie de translation et sous forme d'énergie de rotation, et on note aussi que chaque degré de liberté contribue pour $RT/2$ à l'énergie cinétique.

1.6.2- Energie de translation :

Pour les espèces diatomique et monoatomique on écrit

$$\epsilon_{tr} = \frac{3}{2} \frac{R_0}{M} T \quad (I-23)$$

qui correspond à l'énergie cinétique du centre de masse de la molécule soumise aux trois composantes de la vitesse de translation (trois degrés de liberté).

I.6.3- Energie de rotation :

$$\varepsilon_{\text{rot}} = \begin{cases} \frac{2}{2} \frac{R_0}{M} T & (\text{espèce diatomique}) \\ 0 & (\text{espèce monoatomique}). \end{cases} \quad (\text{I - 24})$$

Qui provient de la rotation de l'ensemble des deux atomes par rapport au centre de masse de la molécule (deux degrés de liberté).

I.6.4- Energie de vibration :

Les énergies de vibration ne commence à se manifester que pour des températures plus élevées ($> 400^\circ \text{K}$); lorsque les chocs moléculaires sont devenus plus importants cette énergie décrit la vibration des atomes autour du centre de masse selon un mouvement oscillatoire.

On constate que cette dernière, sans être négligeable, est petite devant celle de translation et de rotation, les molécules diatomique n'ont pas de mode de déformation, ce qui explique que leur énergie de vibration peut souvent être négligée. [29]. Elle est défini par :

$$\varepsilon_{\text{vib}} = \begin{cases} \frac{R_0}{M} \frac{\theta_v}{e^{+T} - 1} & (\text{espèce diatomique}) \\ 0 & (\text{espèce monoatomique}) \end{cases} \quad (\text{I - 25})$$

Où θ_v est la température caractéristique de vibration de la molécule, ces températures sont montrées dans le tableau ci-dessous :

NO	θ_{v3}	2690°k
O ₂	θ_{v4}	2230° k
N ₂	θ_{v5}	3330° k

Tableau 2 : température caractéristique de vibration [13]

1.6.5- Energie de formation :

Elle représente les variations d'énergie lors de la transformation des atomes en molécules. Une façon simple de modéliser cette variation d'énergie est d'en prendre pour valeur l'enthalpie de formation h° . Initialement, le gaz est composé uniquement de O_2 , N_2 . Les réactions qui s'en suit vont créer les espèces O, N et NO... c'est la raison pour laquelle les enthalpies de formation de O_2 et N_2 sont nulles. on note par h°_i l'enthalpie de formation de l'espèce i. Les valeurs des enthalpies de formation des espèces O, N, NO sont

O	h°_1	$\frac{249.2}{16} 10^6$
N	h°_2	$\frac{472.7}{14} 10^6$
NO	h°_3	$\frac{90.3}{30} 10^6$

Tableau 3: Enthalpie de formation en J/kg

1.6.6- Energie totale :

Si l'on considère le fluide comme un mélange des gaz parfaits, l'énergie totale (par unité de volume) du mélange est la somme des énergies individuelles des différents espèces.

$$E = \sum E_i \quad (I-26)$$

ou encore :

$$E_i = \frac{1}{2} \rho_i V^2 + \rho_i \epsilon_i \quad (I-27)$$

On ϵ_i est énergie spécifique interne par unité de masse de l'espèce i.
on rassemble les divers termes de ϵ_i .

∞. espèce monoatomique :

$$\epsilon_i = \epsilon_{tr} + \Delta \epsilon$$

$$\varepsilon_i = \frac{3}{2} \cdot \frac{R_0}{M_f} T + h_i^0 \quad (\text{I-28})$$

∞. espèce diatomique :

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{tr} + \varepsilon_{rot} + \varepsilon_{vib} + \Delta\varepsilon$$

$$\varepsilon_i = \frac{3}{2} \cdot \frac{R_0}{M_f} T + \frac{2}{2} \cdot \frac{R_0}{M_f} T + h_i^0 + \frac{R_0}{M_f} \cdot \frac{\theta_v}{e^{\frac{\theta_v}{T}} - 1}$$

$$\varepsilon_i = \frac{5}{2} \cdot \frac{R_0}{M_f} T + h_i^0 + \frac{R_0}{M_f} \cdot \frac{\theta_v}{e^{\frac{\theta_v}{T}} - 1} \quad (\text{I-29})$$

Dans ce bilan, il ne nous a pas semblé nécessaire de tenir compte de l'énergie électronique provenant du mouvement des électrons autour du noyau et de l'énergie potentielle induite par les champs de forces électromagnétiques entre les électrons et le noyau. Pour l'air, cette énergie représente moins de 1% de l'énergie totale ; elle est donc négligée dans cette étude.

∞. la définition de l'énergie spécifique interne nous amène à parler des chaleurs spécifiques. Nous étudions un mélange de gaz calorifiquement parfait, autrement dit, des gaz pour lesquels les chaleurs spécifiques sont constantes.

∞. la chaleur spécifique à volume constant s'écrit :

$$C_v = C_{v_{tr}} + C_{v_{rot}} \quad (\text{I-30})$$

avec

$$C_{v_{tr}} = \frac{\partial \varepsilon_{tr}}{\partial T} = \frac{3 R_0}{2 M} \quad (\text{I-31})$$

$$C_{v_{rot}} = \frac{\partial \varepsilon_{rot}}{\partial T} = \frac{2 R_0}{2 M} \quad (\text{I-32})$$

On obtient ainsi pour une espèce :

$$C_{v_{tr}} = \begin{cases} \frac{3 R_0}{2 M_f} & \text{(gaz monoatomique).} \\ \frac{5 R_0}{2 M_f} & \text{(gaz diatomique).} \end{cases} \quad (I-33)$$

∞. la capacité calorifique à pression constante peut être déduite en appliquant la loi de Mayer.

$$C_p - C_v = R \quad (I-34)$$

et l'on obtient ainsi

$$C_{p_i} = \begin{cases} \frac{5 R_0}{2 M_f} & \text{(gaz monoatomique).} \\ \frac{7 R_0}{2 M_f} & \text{(gaz diatomique).} \end{cases} \quad (I-35)$$

∞. la chaleur spécifique à pression et volume constants du mélange s'écrit :

$$C_p = \sum_{i=1}^s Y_i \cdot C_{p_i} \quad (I-36)$$

$$C_v = \sum_{i=1}^s Y_i \cdot C_{v_i} \quad (I-37)$$

∞. l'énergie interne spécifique du mélange s'écrit à partir des énergies spécifiques de chaque espèce :

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^s Y_i \cdot \varepsilon_i \quad (I-38)$$

Dans cette étude, on considère que les énergies de vibration sont à l'équilibre Avec le reste du système c'est à dire que l'on considère une seule température pour toutes les espèces, la température du mélange.

on obtient donc :

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^5 Y_i \cdot C_{v_i} \cdot T + \sum_{i=1}^3 Y_i \cdot h_i^0 + \sum_{i=3}^5 \frac{R_0 \cdot Y_i}{M_i} \frac{\theta_v}{e^{\frac{T}{T}} - 1} \quad (I-39)$$

on obtient enfin l'énergie totale par unité de volume du mélange en ajoutant l'énergie cinétique.

$$E = E_c + \rho \varepsilon$$

On obtient finalement :

$$E = \frac{1}{2} \rho \|\vec{V}\|^2 + \sum_{i=1}^5 \rho_i \cdot C_{v_i} \cdot T + \sum_{i=1}^3 \rho_i \cdot h_i^0 + \sum_{i=3}^5 \frac{R_0 \cdot \rho_i}{M_i} \frac{\theta_v}{e^{\frac{T}{T}} - 1} \quad (I-40)$$

L'équation (I-40) est l'équation d'énergie totale en tenant compte des vibrations. On rappelle ici que nous avons négliger l'énergie de vibration d'ou l'équation (I-40) se réduit à :

$$E = \frac{1}{2} \rho \|\vec{V}\|^2 + \sum_{i=1}^5 \rho_i \cdot C_{v_i} \cdot T + \sum_{i=1}^3 \rho_i \cdot h_i^0 \quad (I-41)$$

I.7- Eléments Aérodynamique :

I.7.1- Aérodynamique hypersonique :

On réserve le qualificatif d'hypersonique aux écoulements à très grands nombres de march.

Dans les écoulements hypersoniques, les ondes de choc deviennent très intenses causant d'importantes variations de quantités physique de l'air, elles produisent des températures très élevées provoquant la dissociation, l'ionisation et la formation de nouveaux composés chimique comme nous l'avons vu aux § I-2.

I.7.2-Phénomènes à l'écoulement à travers les choc intense :

Les phénomènes qui se produisent en aval d'un choc fort sont illustrés schématiquement par la figure 5.

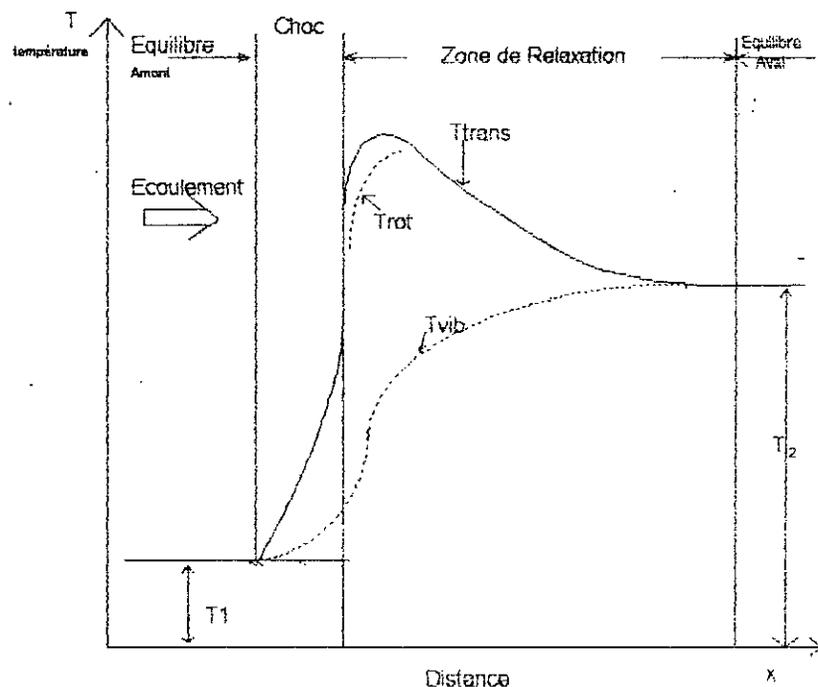


FIG. I.5.- Relaxation d'un gaz diatomique en aval d'un choc intense.

☞. L'accroissement brutale de l'énergie interne du gaz à travers le choc se manifeste tout d'abord sous forme d'une augmentation de l'énergie d'agitation thermique, une évolution vers l'état d'équilibre, caractérisée par l'équipartition de l'énergie (voir fig I-5).

S'effectuant grâce aux collisions entre les particules, et aux températures très élevées.

☞. Une zone de relaxation vers l'équilibre final apparaîtra donc en aval d'un choc intense, dans laquelle une partie de l'énergie de translation et de rotation est cédée aux modes internes ou absorbée par les réactions chimiques qui vont modifier la composition du mélange gazeux, ce processus continuera jusqu'à ce que l'équilibre thermodynamique et chimique soit atteint.

CHAPITRE 2 :

II. NOTIONS DE CINÉTIQUE CHIMIQUE :**II.1. Rôle de cinétique chimique :****II.2. Vitesse d'une réaction :****II.2.1. Vitesse totale :****II.2.2. Vitesse spécifique :****II.2.3. Constante de vitesse :****II.2.4. Degré d'avancement d'une réaction****II.3. Relations empirique d'Arrhénius :****II.4. Détermination expérimentale de l'énergie d'activation :****II.4.1. Définition :****II.4.2. Linéarisation de la relation d'Arrhénius :**

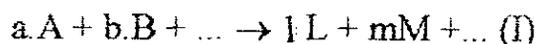
I.1- Rôle de la cinétique chimique :

La thermodynamique ne s'intéresse qu'à des états d'équilibre (initiaux et finaux) et à la possibilité et au sens probable d'une réaction chimique, le temps n'est pas un facteur thermodynamique. Par contre, la cinétique se base sur l'évolution chronologique d'une réaction chimique (variation dans le temps de composition du mélange réactionnel et du degré d'avancement) et au chemin suivi par celle-ci (son mécanisme).

La cinétique est liée à la notion du facteur temps tout en étant partiellement dépendante de certains aspects énergétiques (constante de vitesse et énergie d'activation).

II.2- Vitesse d'une réaction :

Etant donné la réaction :



on exprime généralement la vitesse par rapport à l'une des substances qui y prennent part : réactifs ou produits, ce qui conduit à diverses définitions plus au moins équivalentes.

II.2.1- Vitesse totale :

C'est le nombre de molécules de réactifs dN_A, dN_B, \dots ou de produit dN_L, dN_M qui disparaissent ou apparaissent pendant le temps dt . Sa valeur $\Psi_A, \Psi_B, \dots, \Psi_L, \Psi_M, \dots$ est rapportée au produit par rapport auquel on la définit, elle a pour expression :

$$\Psi_A = - \frac{dN_A}{dt} ; \Psi_B = - \frac{dN_B}{dt} ; \dots ; \Psi_L = + \frac{dN_L}{dt} ; \Psi_M = + \frac{dN_M}{dt} \dots \quad (II.1)$$

Si l'on mesure la vitesse de disparition d'un réactif, la vitesse est affectée du signe (-), si l'on mesure la vitesse de formation d'un produit, elle est précédée du signe (+). L'unité de temps utilisée pour mesurer dt est, en général, la seconde; on emploie également la minute ou l'heure.

II.2.2- Vitesse spécifique :

Il est généralement plus commode d'exprimer la vitesse de réaction par la variation de la concentration d'une substance [propriété intensive (nombre de moles par unité de volume) : $C_i = \frac{N_i}{V}$ où V : unité de volume] par unité de temps. La vitesse spécifique W_i de la réaction par rapport à la substance i sera donnée par la relation :

$$W_i = \frac{1}{V} \Psi_i \quad (\text{II.2})$$

cette expression est générale et valable pour tout genre de réaction et en particulier en ce qui concerne les réactions avec ou sans variation de volume.

II.2.3- Constante de vitesse :

On peut constater expérimentalement que la vitesse spécifique peut se mettre sous la forme du produit :

$$w = k \cdot \text{fonction (concentration instantanées)} \quad (\text{II.3})$$

k est alors appelée constante de vitesse de la réaction, c'est une valeur constante à température fixée.

II.2.4- Degrés d'avancement d'une réaction :

Si l'on suppose que dans la réaction (I), a moles de A et b moles de B disparaissent pour donner naissance à l moles de L et m moles de M, il s'en suit que :

$$-\frac{W_a}{a} = -\frac{W_b}{b} = \frac{W_l}{l} = \frac{W_m}{m}$$

où a , b , l , m sont des coefficients stoechiométriques. Le degré d'avancement (x) d'une réaction est défini comme suit :

$$dx = \frac{-dN_a}{a} = -\frac{dN_b}{b} = +\frac{dN_l}{l} = +\frac{dN_m}{m}$$

cette notation exprime le fait qu'à l'instant t, la production de Xl moles de L et Xm moles de M nécessitent la consommation de Xa moles de A et Xb moles de B.

II.3- Relation empirique d'Arrhénius (1889) :

Arrhénius a posé à priori que l'évolution caractéristique avec la température de la constante de vitesse k était une augmentation exponentielle de la forme :

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_A}{RT}} \quad (\text{II - 4})$$

Où A : est le facteur de fréquence (préexponentiel) qui ne dépend ni des concentrations, ni de la température : on l'appelle encore la constante absolue d'une réaction.

R : est la constante des gaz parfaits ; T est la température de réaction (°k) ;

E_A : énergie d'activation de la réaction.

II.4- Détermination expérimentale de l'énergie d'activation :

II.4.1- Définition :

L'énergie d'activation apparaît comme l'énergie qu'il faut fournir aux réactifs pour leur permettre de franchir la barrière de potentiel qui s'oppose à leur réorganisation, ou encore c'est l'énergie minimale qu'il faudrait fournir à une réaction pour que la majorité des collisions entre les particules soient efficaces et par conséquent, pour que la réaction puisse avoir lieu.

II.4.2- Linéarisation de la relation d'Arrhénius :

A partir de l'équation (II-4), on obtient :

$$\ln k = \ln A - \frac{E_A}{RT} \quad (\text{II-5})$$

ce qui correspond à une variation linéaire de $\ln k$ en fonction de la variable $\frac{1}{T}$ la courbe $\ln k = f\left(-\frac{1}{RT}\right)$ à pour pente :

$$\frac{\ln k}{-1/RT} = E_A \quad (\text{II-6})$$

qui correspond justement à la valeur de l'énergie d'activation. La pente à l'origine, quant, à elle permet de calculer la valeur du facteur préexponentiel. Deux valeurs de k suffisent pour une détermination de l'énergie d'activation, mais on préfère utiliser une série de mesure pour s'assurer que les points expérimentaux s'alignent sur une droite.

CHAPITRE 3 :

III- La relaxation chimique.

III.1- Introduction

III.2- Les équations d'évolution :

III.2.1- La conservation de la masse des chimiques.

III.2.2- L'équation de conservation de l'enthalpie

III.3- Propriétés du choc normal

III.3.1- Conditions à l'aval du choc

III.3.2- Calcul approximatif de la couche de choc

III.4-Description mathématique du modèle physique

III.4.1- Les équations

III.4.2- Les conditions au bord

III.5- Le calcul du termes sources

III-La relaxation chimique :

III.1- Introduction :

Si l'on excepte les termes visqueux, les équations d'Euler peuvent fournir de nombreux renseignements sur la distribution de pression et de température à l'extérieur de la couche limite.

III.2- Les équations d'évolution :

III.2.1- La conservation de la masse des espèces chimiques :

On note Y_i fraction massique de l'espèce chimique i , en présence du champ de vitesse V , la conservation de Y_i est exprimée par l'équation.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \text{div}(\rho \vec{V} \cdot Y_i + J_i) = \Omega_i \quad (\text{III.1})$$

où

$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)$ représente le taux d'échange de la masse des espèces chimiques par unité de volume.

la quantité $(\rho \vec{V} \cdot Y_i)$ est le flux de convection de ces espèces.

Ce symbole J_i indique le flux de diffusion, la divergence de ces deux flux forme le second terme de l'équation différentielle. La quantité Ω_i est le taux de génération de ces espèces chimiques par unité de volume.

La génération est causée par la réaction chimique, la valeur de Ω_i peut être positive, (resp.négative) si la réaction à un instant donné, produit (resp. consomme) les espèces chimiques, ou nulle lorsque ces espèces n'entrent pas en réaction. [24]

Dans notre étude, le flux de diffusion est considéré nul, alors l'équation (III.1) se réduit en :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \text{div}(\rho \vec{V} \cdot Y_i) = \Omega_i \quad (\text{III.2})$$

Le mélange gazeux se compose de cinq espèces chimiques décrites dans le chapitre (I), les équations de conservations algébriques (I.12) et (I.15) qui y sont présentées permettent de ne résoudre que trois

équations aux dérivées partielles (pour O, N et NO), les deux fractions massiques restantes (O₂ et N₂) étant déduites des autres.

III.2.2- L'équation de conservation d'enthalpie :

L'équation de conservation d'énergie (dernière équation d'Euler) s'écrit de façon générale.

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \text{div}((E + P)\vec{V}) = 0 \quad (\text{III-5})$$

On introduit l'enthalpie totale par unité de masse

$$H = \frac{E + P}{\rho} = \frac{1}{2} V^2 + h \quad (\text{III-6})$$

où également :

$$H = \frac{1}{2} V^2 + \sum_{i=1}^5 Y_i h_i^0 + \sum_{i=1}^5 Y_i C_{P_i} T \quad (\text{III-7})$$

L'équation de conservation (III-5) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} E + \text{div}(\rho \cdot \vec{V} \cdot H) = 0 \quad (\text{III-8})$$

on en déduit alors , qu'à l'état stationnaire :

$$\operatorname{div}(\rho \cdot \vec{V} \cdot H) = 0$$

où de façon équivalente :

$$\operatorname{div}(\rho \cdot \vec{V}) \cdot H + (\rho \cdot \vec{V}) \cdot \vec{\nabla} H = 0$$

La satisfaction de l'équation de continuité implique que :

$$\operatorname{div}(\rho \cdot \vec{V}) = 0$$

et donc ;

$$\vec{V} \cdot \vec{\nabla} H = 0 \quad (\text{III-9})$$

On en conclut que H est constante le long d'une ligne de courant. Si toutes les lignes de courant proviennent d'un même écoulement uniforme, H est constante partout (écoulement iso-énergétique).

Ainsi, on obtient l'équation de conservation de l'enthalpie

$$H = \text{cst} \quad (\text{III-10})$$

C'est avec cette équation et l'expression de l'énergie donnée dans le premier chapitre que l'on calcule la température à partir des fractions massiques.

Dans toute cette étude, l'énergie de vibration n'est pas prise en compte (elle représente environ 2% de l'E. T.).

III.3- Propriété du choc normal :

III.3.1- Conditions à l'aval du choc :

Dans notre étude ρ et V sont constantes leurs valeurs sont celles obtenus immédiatement derrière un choc droit. Pour les calculer on rappelle ici, les conditions de saut ou relation de Rankine-Hugoniot qui fournissent les propriétés de l'écoulement derrière un choc droit en fonction du nombre de Mach à l'infini : M_∞ et du rapport des chaleurs spécifiques γ

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{p}{p_\infty} = \frac{2\gamma}{\gamma+1} M_\infty^2 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \\ \frac{\rho}{\rho_\infty} = \frac{\gamma+1}{2} \frac{M_\infty^2}{1 + \frac{\gamma-1}{2} M_\infty^2} \\ \frac{T}{T_\infty} = \frac{p}{p_\infty} \frac{\rho_\infty}{\rho} \\ \frac{v}{v_\infty} = \frac{\rho_\infty}{\rho} \end{array} \right. \quad (\text{III-11})$$

Les propriétés de l'écoulement en Amont du choc sont données explicitement dans le premier chapitre.

III.3.2- Calcul approximatif de la couche de choc :

La couche de choc est la distance de choc à la paroi : on fait l'hypothèse que la tête d'engin est conique à Nez plat, un calcul préliminaire de la distance relative du choc détaché, à partir de l'équation de continuité sachant que le choc détaché est plan dans la partie qui fait face au Nez, et Δ sa distance (voir figure III.1)

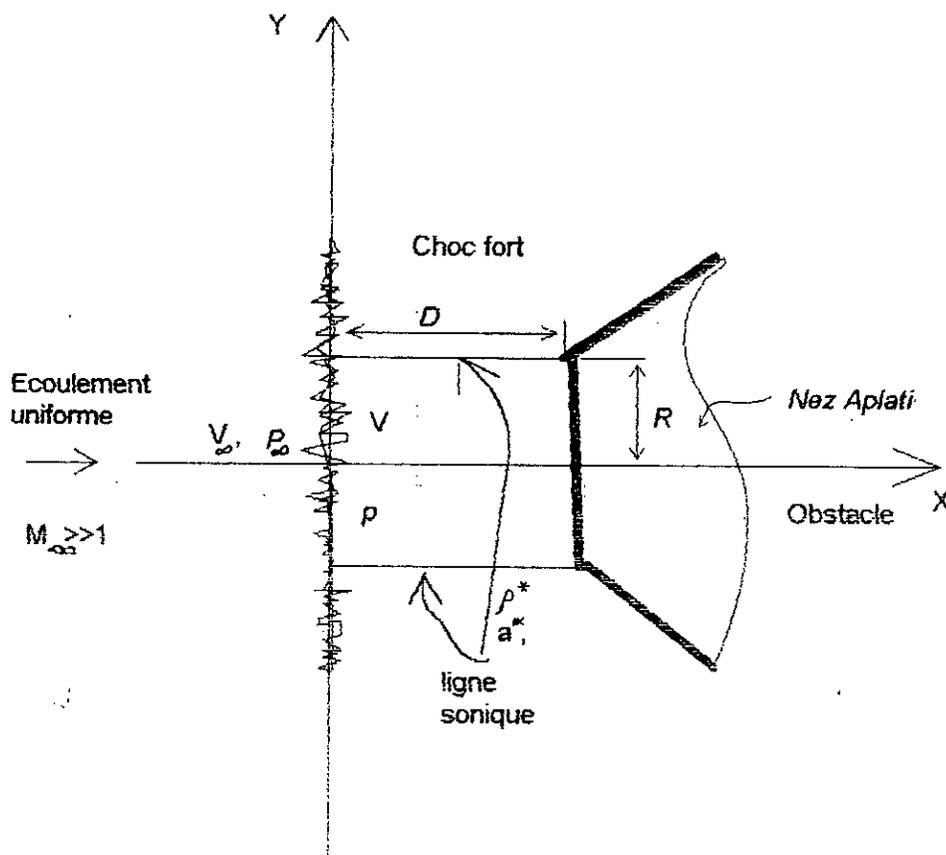


fig III-1

On suppose que la surface latérale de Rayon R entre l'onde de choc et le Nez est sonique (ligne sonique rectiligne) par suite, l'égalité des débits traversant le choc et la surface latérale s'écrit, en désignant par ρ^* et a^* respectivement la masse volumique et la vitesse du son au col de l'écoulement en Aval du choc .

$$\rho_\infty V_\infty \pi R^2 = \rho^* a^* 2\pi R \Delta \quad (\text{III-12})$$

Ainsi,

$$\frac{\Delta}{R} = \frac{1}{2} \cdot \frac{V_{\infty}}{a^*} \frac{\rho_{\infty}}{\rho^*} \quad (\text{III.13})$$

La vitesse de son est la même au col fictif Amont (a_{c_0}) et au col Aval (a^*) par suite.

$$\frac{V_{\infty}}{a^*} = \frac{V_{\infty}}{a_{c_0}}$$

Or, $\frac{V_{\infty}}{a_{c_0}}$: vitesse réduite s'exprime en fonction du nombre de Mach M_{∞}

$$\frac{V_{\infty}}{a_{c_0}} = \sqrt{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1 + \frac{2}{M_{\infty}^2}}} \quad (\text{III-14.a})$$

à la limite

$$\frac{V_{\infty}}{a_{c_0}} = \sqrt{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} = \frac{1}{\sqrt{K}} \quad (\text{III-14.b})$$

Dans ces mêmes conditions, le rapport des masses volumiques $\frac{\rho}{\rho_{\infty}}$ de part et

d'autres du choc tend vers $\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} = \frac{1}{K}$

de plus

$$\frac{\rho_{\infty}}{\rho^*} = \frac{\rho_{\infty}}{\rho} \frac{\rho}{\rho^*}$$

Ainsi :

$$\frac{\rho_{\infty}}{\rho^*} = \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}}$$

Soit encore :

$$\frac{\rho_{\infty}}{\rho^*} = k \cdot \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \quad (\text{III-15})$$

Ainsi :

$$\frac{\Delta}{R} = \frac{1}{2} \sqrt{k} \cdot \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma + 1}} \quad (\text{III-16})$$

$k = 1/6$ pour $\gamma = 1,4$

Soit encore :

$$\Delta / R \approx 0.32 \quad (\text{III-17})$$

Expérimentalement, la distance de la couche de choc Δ . Pour un rayon $R = 0,3\text{m}$ est : [24]

$$\Delta = 0,1 \text{ m}$$

$$\Delta = 100 \text{ mm.}$$

Alors qu'à partir de l'équation (III.17), pour un même rayon, on trouve.

$$\Delta = 0,3 \times 0,32 = 0,096 \text{m} = 96 \text{mm}$$

Ce qui nous permet de prendre la longueur expérimentale comme longueur du domaine d'étude.

III.4- Description mathématique du modèle physique :

III.4.1- Les équations :

Pour l'étude d'un écoulement réactif monodimensionnel non visqueux, le système (III.2) à résoudre se compose des équations d'Euler classiques auquel il faut ajouter les équations de bilan d'espèces chimiques, nous recherchons la solution stationnaire de ce système qui s'écrit en formulation conservative et en une dimension d'espace.

$$\begin{cases} \text{div}(\rho \cdot Y_i \cdot \vec{V}) = \Omega_i & i=1,2,3 \\ T = f(Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5) \end{cases} \quad (\text{III-18})$$

La température est obtenue à partir des fractions massiques à l'aide de l'équation de conservation de l'enthalpie totale (III.10). En monodimensionnel, le système se réduit à :

$$\begin{cases} (\rho \cdot Y_i \cdot V)_x = \Omega_i & i=1,2,3 \\ Y_4 = \frac{24}{103} - Y_1 - \frac{8}{15} \cdot Y_3 \\ Y_5 = \frac{79}{103} - Y_2 - \frac{7}{15} \cdot Y_3 \\ T = \frac{H_{\infty} - \frac{1}{2} \cdot V^2 - \sum_{i=1}^3 Y_i \cdot h_i^0}{\sum_{i=1}^5 Y_i \cdot C_{p_i}} \end{cases} \quad (\text{III-19})$$

III.4.2- Les conditions aux bords :

Nous étudions un écoulement, monodimensionnel, pour lequel le domaine étudié est δD voir (fig.III.2).

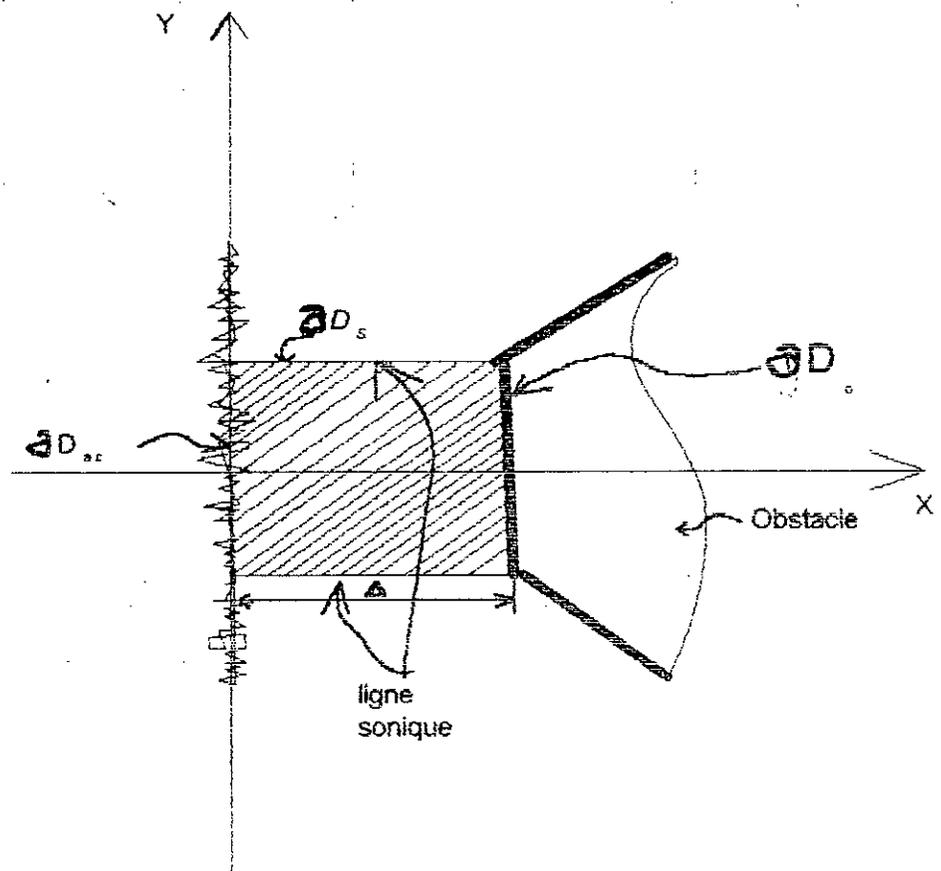


fig III-2. Domaine d'étude

Le bord du domaine se décompose en trois parties

$$\delta D = \delta D_{ac} \cup \delta D_o \cup \delta D_s$$

δD_{ac} : est le bord amont du domaine et en aval du choc, l'écoulement est réactif, il est défini par des valeurs (T, P, ρ et M) déterminées dans ce chapitre par les relations de Rankine-Hugoniot (III.11).

δD_s : est la partie du bord où l'écoulement sort du domaine. L'écoulement dans cette partie est sonique, il n'y a pas de conditions particulières à imposer, l'information sort du domaine.

δD_o : est la paroi de l'obstacle à la quelle on impose les conditions de glissement :

$$\vec{V} \cdot \vec{n} = 0$$

\vec{n} étant la normale sortante à la paroi

III.4.3- Les conditions aux limites :

On s'intéresse ici aux solutions stationnaires de l'équation (III.2) la condition initiale est donc arbitraire.

En général, la condition initiale est l'écoulement infini, uniforme dans tout le domaine.

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = y_2 = y_3 = 0 \\ y_4 = \frac{24}{103} \\ y_5 = \frac{79}{103} \end{array} \right. \quad (\text{III.20})$$

T: température derrière le choc droit

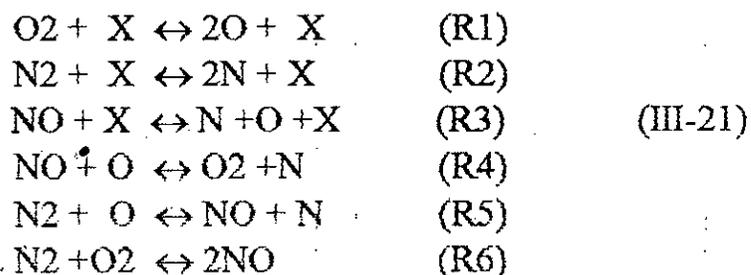
Les variables ρ et V sont constantes, le système est hyperbolique en temps et en espace. Les termes sources Ω_i sont calculés à l'aide des valeurs proposées par Rakich et al. Ils sont de type $(\Omega_i(Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5, T, \rho))$.

III.5- Le calcul du termes sources :

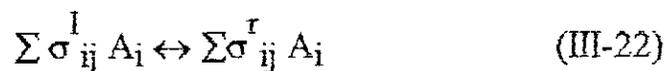
On reproduit ici le modèle proposé par Rakich et al. que nous utilisons pour calculer les termes sources dans notre étude monodimensionnelle.

Nous allons expliquer comment calculer les termes sources à partir d'un modèle à réactions.

Soit le modèle à 18 réactions suivant :



On considère donc i espèce ($i=1,5$) et j réactions ($j=1,6$). Les réactions peuvent se réécrire en faisant apparaître les coefficients stoechiométriques σ_{ij}^l et σ_{ij}^r pour les états gauche et droite.



Ainsi pour une espèce donnée, le taux de production est

$$\Omega_i = m_i \cdot \sum_{j=1}^6 \left(\sigma_{ij}^l - \sigma_{ij}^r \right) V_j
 \tag{III-23}$$

où V_j (kmol/m³.s) représente la vitesse d'une réaction.

Dans un notre cas :

$$\left\{ \begin{aligned}
 \Omega_1 &= m_1(2V_1 + V_3 - V_4 - V_5) \\
 \Omega_2 &= m_2(2V_2 + V_3 + V_4 + V_5) \\
 \Omega_3 &= m_3(V_3 - V_4 + V_5 + 2V_6) \\
 \Omega_4 &= m_4(-V_1 + V_4 - V_6) \\
 \Omega_5 &= m_5(-V_2 - V_5 - V_6)
 \end{aligned} \right.
 \tag{III-24}$$

Si l'on note $k_{lj}(T)$ et $k_{rj}(T)$ les taux de réactions, désignés par fois par les termes ; coefficient ou constante de vitesse, associés aux parties directes et indirectes de la réaction. Ainsi pour une réaction chimique (R_j) du modèle, contenant une espèce i , sa vitesse de réaction V_j (voir démonstration dans l'annexe A), est donnée par :

$$V_j = k_{rj}(T) \left[K_{eq_j}(T) \prod_{i=il} (\rho q_i)^{\sigma_{ij}^l} - \prod_{i=ir} (\rho q_i)^{\sigma_{ij}^r} \right] \quad (\text{III - 25})$$

où

il (resp. ir) représente les espèces présentés dans la partie gauche (resp. droite) de la réaction (R_j).

En pratique, pour les taux de réactions inverses, on écrit :

$$k_{rj}(T) = f_j(T) \exp \left(-\frac{E_j}{RT} \right) \quad (\text{III - 26})$$

$f_j(T)$; appelé facteur de fréquence ou facteur préexponentiel, est donné, comme E_j , par l'expérience. Pour calculer $f_j(T)$ il faudrait appliquer la mécanique quantique, ce qui n'a pas été fait que dans des cas très simples. Cependant, pour les réactions du modèle, Rakich et Al., ont déterminés expérimentalement leurs coefficients de taux inverse, les trois premières réactions ont été explicité sous la forme suivante :

$$k_{rj}(T) = \sum_{i=1}^5 k_{ji} q_i \quad (\text{III - 27})$$

Où

$$k_{ji} = b_j T^{l_j} \exp \left(-\frac{D_j}{KT} \right) \quad (\text{III - 28})$$

les valeurs b_j , I_j et la température D_j/k sont celles proposées par Rakich et reproduites dans l'annexe B. La température T est en °k.

Nous avons aussi reproduit dans l'annexe B, les coefficients de taux inverse, pour les réactions binaires du modèle.

$K_{eq_j}(T)$: représente la constante d'équilibre de la réaction chimique (R_j).

Rakich et Al ont aussi déterminé expérimentalement les constantes d'équilibre des trois premières réactions du modèle (R_1), (R_2) et (R_3), ils en ont explicité sous la forme suivante :

$$K_{eq_j}(T) = \left(a_{1j} + a_{2j} T + a_{3j} T^2 \right) \exp \left(- \frac{\Delta H_j}{RT} \right) \quad (\text{III - 29})$$

où

ΔH_j : est la variation d'enthalpie de la réaction. Les valeurs a_{ij} et la température sont celles proposées par Rakich et reproduites, aussi dans l'annexe B.

La température T est en °k.

Nous allons maintenant déduire les autres constantes, déterminons d'abord pour la réaction R_4 , l'expression de sa constante d'équilibre.

Soit la réaction suivante :



De la loi d'action de masse.

$$K_{eq_4}(T) = \frac{[\text{O}_2][\text{N}]}{[\text{NO}][\text{O}]} \quad (\text{III - 30 - a})$$

Pour le cas des systèmes gazeux

$$K_{eq_4}(T) = \frac{P_{\text{N}_2} P_{\text{N}}}{P_{\text{NO}} P_{\text{O}}} \quad (\text{III - 30 - b})$$

P_i est la pression partielle de l'espèce chimique i .

L'équation d'état des gaz parfait, appliquée à la substance (O_2) s'écrit :

$$P_{O_2} = \left(\frac{\rho_{O_2}}{m_{O_2}} \right) R.T \quad (\text{III-31 a})$$

la densité de la substance O_2 , notée ρ_{O_2} , est par définition égale à la quantité $\rho \cdot Y_{O_2}$

On rappelle ici que Y_{O_2} , est la fraction massique du gaz O_2 .

On déduit :

$$P_{O_2} = \rho \left(\frac{Y_{O_2}}{m_{O_2}} \right) R.T \quad (\text{III-31 b})$$

en posant :

$$q_{O_2} = \frac{Y_{O_2}}{m_{O_2}}$$

soit encore ; $P_{O_2} = \rho \cdot q_{O_2} \cdot R.T \quad (\text{III-31.c})$

de même, on aura :

$$\begin{aligned} P_N &= \rho \cdot q_N \cdot R.T \\ P_O &= \rho \cdot q_O \cdot R.T \\ P_{NO} &= \rho \cdot q_{NO} \cdot R.T \end{aligned} \quad (\text{III-32})$$

Par suite, en remplaçant dans $keq_4(T)$

On obtient :

$$K_{eq4}(T) = \frac{q_{O_2} q_N}{q_{NO} q_O} \quad (\text{III - 32 . a})$$

multiplions et devisions le second membre par q_O .

On déduit ainsi,

$$k_{eq4}(T) = \frac{k_{eq3}(T)}{K_{eq1}(T)} \quad (\text{III - 32 . b})$$

de même on aura pour les autres réactions

$$k_{eq5}(T) = \frac{k_{eq2}(T)}{K_{eq1}(T)} \quad (\text{III - 33})$$

et

$$k_{eq6}(T) = \frac{k_{eq2}(T) \cdot K_{eq1}(T)}{K_{eq3}^2(T)} \quad (\text{III - 34})$$

Cependant, connaissant les constantes d'équilibre des réactions chimiques à une température donnée on en déduira ainsi, celles des réactions binaires ((R_4), (R_5) et (R_6)) dans les mêmes conditions de température; en utilisant les relations (II.33) et (II.34).

CHAPITRE 4 :

IV-Résolution du problème

IV.1-Résolution du problème par la méthode de Runge-Kutta

IV.2-Résolution du problème par des méthodes pseudo-instationnaire

IV.2.1-Méthode explicite

IV.2.1.a-Schéma d'ordre 1

IV.2.1.b-Schéma d'ordre 2

IV.2.2-Méthode implicite

IV.3-Résultats et commentaires

IV.3.1-Introduction

IV.3.2-Méthode de Runge-Kutta

IV.3.3-Méthode explicite

IV.3.4-Méthode implicite

IV.3.5-Conclusion

IV. Résolution du problème :

Dans ce chapitre, on va résoudre le système (III-19) ; qui modélise les phénomènes de dissociation chimique et de relaxation derrière un choc fort détaché, par des méthodes particulièrement bien adaptées.

Dans un premier temps, on résout le système stationnaire par une méthode d'avancement en espace particulièrement bien adaptée au cas d'un écoulement uniforme, puis, par deux méthodes d'intégration en temps : explicite et implicite.

VI.1. Résolution du problème par la méthode de Rung-Kutta

Dans ce paragraphe, on va écrire et tester une méthode numérique particulièrement bien adaptée à la résolution du problème stationnaire dont lequel le système s'écrit :

pour $i = 1, 2$ et 3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot Y_i \cdot V) = \Omega_i \\ Y_4 = \frac{24}{103} - Y_1 - \frac{8}{15} Y_3 \\ Y_5 = \frac{79}{103} - Y_2 - \frac{7}{15} Y_3 \\ T = \frac{H_\infty - \frac{1}{2} V^2 - \sum_{i=1}^3 Y_i \cdot h_i^0}{\sum_{i=1}^5 Y_i \cdot C_{p_i}} \end{array} \right. \quad (\text{IV.1})$$

Le problème stationnaire est hyperbolique en espace, on le résout par une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 non-linéaire que nous rappelons brièvement.

On définit le vecteur de densités partielles.

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \cdot Y_1 \\ \rho \cdot Y_2 \\ \rho \cdot Y_3 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.2})$$

et l'on réécrit le système sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaire d'ordre 1.

$$\frac{\partial}{\partial x}(V, W) = \Omega(W, T, \rho) \quad (\text{IV.3.a})$$

ou bien :

$$\frac{\partial}{\partial x} W = \frac{\Omega(W, T, \rho)}{V} = G(W, T, \rho) \quad (\text{IV.3.b})$$

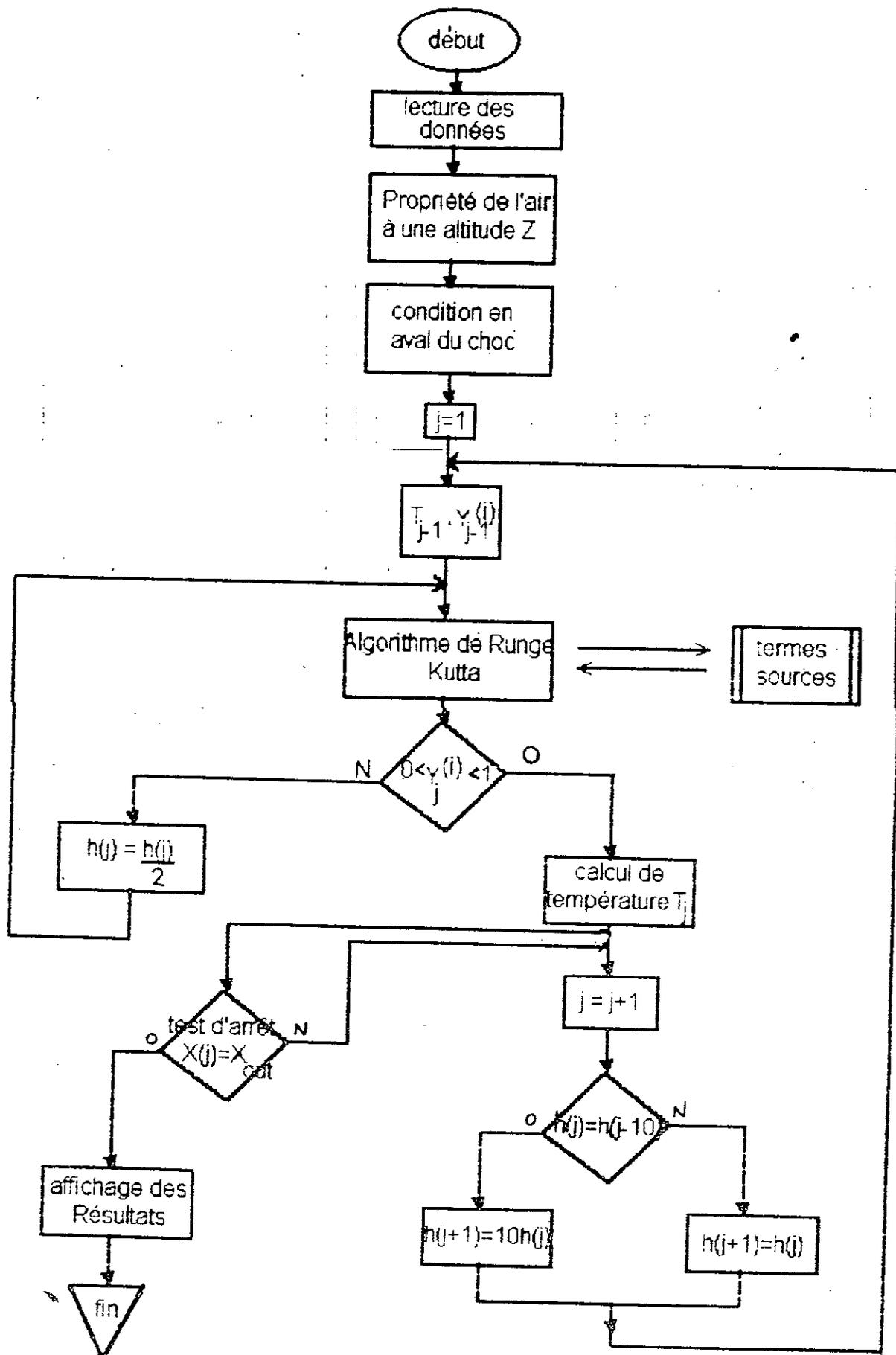
connaissant la valeur de l'inconnue W au noeud j d'abscisse x_j , on calcule la valeur de W au noeud suivant $j+1$ d'abscisse $x_{j+1} = x_j + h$ en appliquant le schéma explicite à quatre pas suivant :

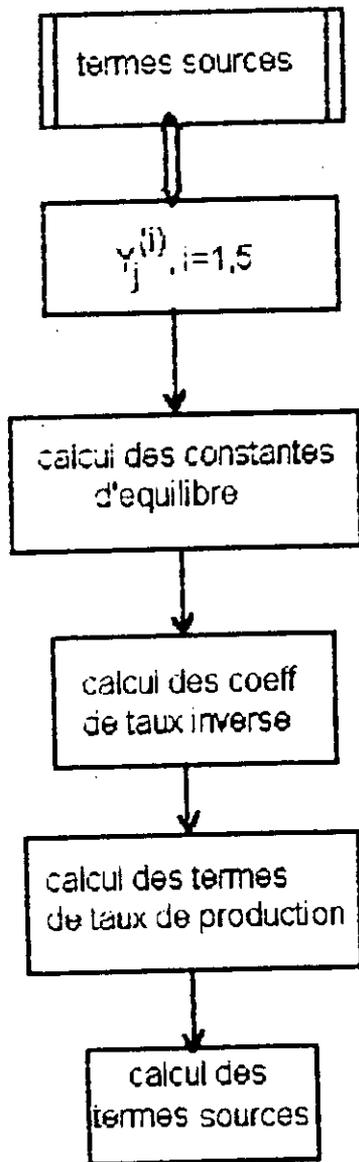
$$\left\{ \begin{array}{l} W_{j+1} = W_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2.k_2 + 2.k_3 + k_4) \\ \text{avec} \\ k_1 = G(W_j, T_j, \rho) \\ k_2 = G\left(W_j + \frac{h}{2}k_1, T_j, \rho\right) \\ k_3 = G\left(W_j + \frac{h}{2}k_2, T_j, \rho\right) \\ k_4 = G(W_j + h.k_3, T_j, \rho) \end{array} \right. \quad (\text{IV.4})$$

puis, les trois composantes de W_{j+1} étant calculées, les autres inconnues Y_{j+1} (4), Y_{j+1} (5) et T_{j+1} sont déduites à l'aide du système (IV.1) et l'on réitère le processus pour couvrir tout le domaine d'étude.

En revanche, on fait apparaître sur un schéma synoptique l'enchaînement des différentes phases de travail arithmétique à effectuer, correspondant à la méthode choisie.

ORGANIGRAMME DE RUNGE-KUTTA :





VI.2. Résolution du problème par des méthodes pseudo-instationnaires :

Le système instationnaire étant hyperbolique quel que soit le régime de l'écoulement, une méthode d'avancement en temps permet, à partir d'une solution initiale arbitraire, d'atteindre la solution stationnaire après un certain nombre d'itération. On ne s'intéresse donc pas à la précision en temps, mais on souhaite que la précision spatiale de la solution stationnaire soit élevée (si possible d'ordre deux). Pour cela, on développe des méthodes de résolutions pour ce problème, nous allons commencer par une méthode explicite, simple à implémenter.

IV.2.1. Méthode explicite :

On emploie la méthode des volumes finis qui correspond à une discrétisation sous forme intégrale des lois de conservation à l'aide de la même notation employée dans le cas stationnaire, le système (VI.1) s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} W + \frac{\partial}{\partial x} F(W) = \Omega & \text{sur } \partial D \times] 0, T [\\ W(x, 0) = W_0(x) & \text{sur } \partial D \end{cases} \quad (\text{IV.5})$$

Le terme du flux $F(W) = V.W$ est linéaire, mais le terme source Ω est fortement non linéaire.

Le domaine est décritisé en $N+1$ points x_j et chaque interval est dévisé en deux pour former une cellule.

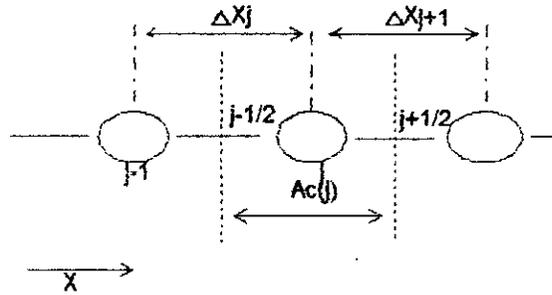


Fig.IV-1: Illustration de la grille pour un problème monodimensionnel

$$\Delta X_j = X_j - X_{j-1}$$

Aire $Ac(j)$

$$Ac(j) = \frac{\Delta X_j + \Delta X_{j+1}}{2}$$

$$Ac(j) = X_{j+\frac{1}{2}} - X_{j-\frac{1}{2}}$$

ou encore :

$$Ac(j) = \frac{X_{j+1} - X_{j-1}}{2}$$

au temps t , on intègre l'équation (IV.5) sur le domaine après multiplication par les fonctions test φ_j qui sont les fonctions caractéristiques des cellules c_j

$$\varphi_j(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } X \in C_j \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

le système devient alors

$$\int_{C_j} \left(\frac{\partial}{\partial t} W + \frac{\partial}{\partial X} F(W) \right) dx = \int_{C_j} \Omega(W) dx$$

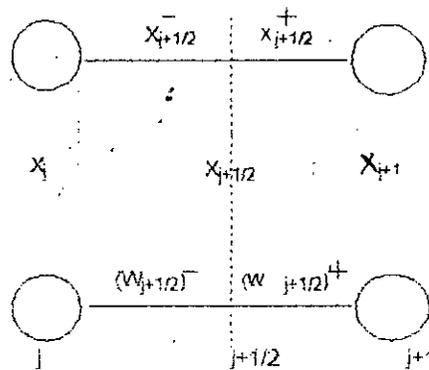
$$\left(\frac{\partial}{\partial t} W \right)_{C_j} \int_{C_j} dx + F(W_j) \Big|_{X_{j-\frac{1}{2}}}^{X_{j+\frac{1}{2}}} = \Omega(W_j) \int_{C_j} dx$$

sachant que

$$\int_a dx = \text{aire}(C_j)$$

on obtient alors :

$$\text{aire}(C_j) \left(\frac{\partial}{\partial t} W \right)_j + F(W_{j+1/2}^-) - F(W_{j-1/2}^+) = \text{aire}(C_j) \Omega(W_j)$$



on applique le schéma d'Euler rétrograde pour la dérivée en temps et le schéma explicité s'écrit :

$$\text{aire}(C_j) \cdot \frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} + F(W_{j+1/2}^-)^n - F(W_{j-1/2}^+)^n = \text{aire}(C_j) \Omega(W_j^n) \quad (\text{IV.6})$$

où :

j : représente l'incrémentation en espace.

n : représente l'incrémentation en temps.

a. Schéma d'ordre 1 :

La vitesse étant constante et positive, un schéma décentré d'ordre un s'obtient très simplement en posant :

$$F(W_{j+1/2}^-)^n = V \cdot W_j^n \quad \text{et} \quad F(W_{j-1/2}^+)^n = V \cdot W_{j-1}^n$$

remplaçons dans (IV.6) ; on obtient :

$$\text{aire } C(j) \cdot \frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} + V \cdot W_j^n - V \cdot W_{j-1}^n = \text{aire}(C_j) \Omega(W_j^n)$$

enfin le schéma devient :

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \frac{\Delta t}{\text{aire } C_j} V \cdot (W_j^n - W_{j-1}^n) + \Delta t \Omega(W_j^n) \quad (\text{IV.7})$$

b. Schéma d'ordre deux :

Afin d'étendre le schéma à l'ordre deux en espace, on adopte la démarche proposée par B. Van leer, en posant :

$$(W_{j+1/2}^-)^n = W_j^n + \frac{\Delta X_{j+1}}{2} W_x^n)_j$$

Où $W_x)_j$: est un gradient de W sur la cellule c_j .

Pour préserver la monotonie, on emploie des pentes limitées introduites par G. Van Albada et B. Van leer

$$W_x^n)_j = \text{Moy} \left(\frac{W_j^n - W_{j-1}^n}{X_j - X_{j-1}} ; \frac{W_{j+1}^n - W_j^n}{X_{j+1} - X_j} \right)$$

avec

$$\text{Moy}(a ; b) = \frac{(a^2 + \varepsilon) b + (b^2 + \varepsilon) a}{a^2 + b^2 + \varepsilon} \quad \varepsilon \text{ tré s petit}$$

et en réservant $(W_{j-1/2}^n)^n = W_{j-1}^n$

remplaçant dans l'équation (IV.6).

$$\text{aire } C(j) \frac{W_j^{n+1} - W_j^n}{\Delta t} + V W_j^n + V \frac{\Delta X_{j+1}}{2} W_x^n)_j - V W_{j-1}^n = \text{aire}(C_j) \Omega(W_j^n)$$

soit encore :

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \frac{\Delta t}{\text{aire } C_j} V \cdot (W_j^n - W_{j-1}^n + \frac{\Delta X_{j+1}}{2} W_x^n)_j + \Delta t \Omega(W_j^n) \quad (\text{IV.8})$$

en effet, nous construisons un schéma explicite du premier ordre en temps et quasi d'ordre 2 en espace (le schéma étant ramené à l'ordre 1 à l'origine).

En résumé, la solution initiale peut être uniforme c'est-à-dire égale aux valeurs immédiatement derrière le choc (conditions en $x=0$ du problème stationnaire). On contrôle la convergence itérative vers la solution stationnaire en évolant à chaque pas du temps le résidu,

$$RES = \sqrt{\sum_j \text{aire}(C_j) \left\| \Omega(W_j^n) - \frac{F(W_{j+1/2}^-)^n - F(W_{j-1/2}^+)^n}{\text{aire}(C_j)} \right\|^2}$$

$$RES \cong \left\| \Omega - \frac{\partial}{\partial X} F(W) \right\|_L$$

qui a pour expression:

Pour le schéma d'ordre 1:

$$RES = \sqrt{\sum_j \text{aire}(C_j) \left\| \Omega(W_j^n) - \frac{V}{\text{aire}(C(j))} (W_j^n - W_{j-1}^n) \right\|^2} \quad (\text{IV.9})$$

Et pour le schéma d'ordre 2:

$$RES = \sqrt{\sum_j \text{aire}(C_j) \left\| \Omega(W_j^n) - \frac{V}{\text{aire}(C(j))} \left(W_j^n - W_{j-1}^n + \frac{\Delta X_{j+1}}{2} W_{xj} \right) \right\|^2} \quad (\text{IV.10})$$

2.2. Méthode implicite :

Un schéma totalement implicite (sur la convection et sur le terme source) du premier ordre appliqué à l'équation (IV.5) s'écrit :

$$\frac{W^{n+1} - W^n}{\Delta t} + \frac{\partial}{\partial X} F(W^{n+1}) = \Omega(W^{n+1}) \quad (\text{IV.11})$$

on linearise le flux $F(W^{n+1})$ et le terme source $\Omega(W^{n+1})$ en W^n

$$\begin{aligned} F(W^{n+1}) &= F(W^n) + F'(W^n) \cdot (W^{n+1} - W^n) + O(\Delta t^2) \\ &= F(W^n) + V \cdot (W^{n+1} - W^n) + O(\Delta t^2) \end{aligned}$$

$$\Omega(W^{n+1}) = \Omega(W^n) + \Omega'(W^n) \cdot (W^{n+1} - W^n) + O(\Delta t^2)$$

en utilisant la définition $F(W) = V \cdot W$ et $F'(W) = V \cdot Id$, on injecte ces relations dans le schéma (IV.11) et l'on écrit sous la forme de " Δ -schéma ".

$$\left(Id - \Delta t \cdot \Omega(W^n) + V \cdot \Delta t \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) (W^{n+1} - W^n) = \Delta t \left(\Omega(W^n) - V \cdot \frac{\partial}{\partial x} W^n \right) \quad (IV-12)$$

qui est le schéma implicite d'EUIER linearisé classique sous forme discrète en temps et continue en espace. Une formulation volume finis de ce schéma est obtenue en intégrant cette équation sur une cellule c_j . Pour cela on utilise l'approximation du second ordre décrite dans le paragraphe précédent pour évaluer les termes explicites qui contrôlent la précision de la solution stationnaire. Cependant, dans la phase implicite qui ne sert que de prédicteur, on applique un simple schéma décentré du premier ordre. On obtient le schéma suivant :

$$\left(\left(1 + \frac{V \Delta t}{\text{aire}(c_j)} \right) Id - \Delta t \cdot \Omega(W_j^n) \right) \delta W_j - \frac{V \Delta t}{\text{aire}(c_j)} \cdot \delta W_{j-1} = \Delta t \left(\Omega(W_j^n) - \frac{V}{\text{aire}(c_j)} \cdot (W_{j+1/2} - W_{j-1/2}) \right) \quad (IV-13)$$

Où

$$\delta W = W^{n+1} - W^n = \begin{pmatrix} W_1^{n+1} - W_1^n \\ \vdots \\ W_N^{n+1} - W_N^n \end{pmatrix}$$

En rassemblant ces équations, on obtient le système matriciel.

$$A.\delta W = R \quad (IV-14)$$

Où A est une matrice bidiagonale par bloc.

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ b_2 & a_2 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & b_N & a_N \end{bmatrix}$$

Dans laquelle les blocs 3x3 ont pour définition :

$$a_j = \left(\left(1 + \frac{V\Delta t}{\text{aire}(c_j)} \right) I_{d3x3} - \Delta t \cdot \Omega_j^n \right)$$

$$b_j = -\frac{V\Delta t}{\text{aire}(c_j)} \cdot I_{d3x3}$$

Ainsi, pour résoudre ce problème monodimensionnel hyperbolique en espace compte tenu de la nature bidiagonale de la matrice, on obtient la "solution implicite" très simplement en un seul balayage.

VI.4. Résultats et commentaires :

VI.4. Introduction :

Nous présentons dans cette partie les résultats numériques et graphiques des méthodes de résolution que nous avons présentés dans ce chapitre.

Les résultats de ces diverses méthodes nous permettent de présenter, en fin de ce chapitre, quelques conclusions et remarques utiles quand à l'utilisation de ces méthodes.

VI.4.2. Méthodes de Runge-Kutta :

Le problème est raide et dépend fortement de la température et donc du nombre de Mach. On définit : $F_i(y_i, T, \rho) = \frac{\rho_i(y_i, T, \rho)}{\rho V}$

Les termes source $F_i(y_i, T, \rho)$ sont représentés sur les figures g1, g2 et g3 pour des valeurs du nombre de Mach à l'infini respectivement égales à $M_\infty = 25, 20$ et 15 et une altitude d'environ 65km.

On remarque que pour $M_\infty = 25$ (fig. g1), le terme source F_2 , dont la valeur initiale est 9000, décroît sur une distance de 0,1mm. La variation est plus faible lorsque $M_\infty = 20$ (fig. g2) puisque le terme F_2 diminue sur une distance de 1mm, la valeur initiale étant 600. La variation est encore plus faible pour $M_\infty = 15$ (fig. g3), F_1 décroît sur une distance de 1cm et sa valeur initiale est 50.

Le problème étant non linéaire et très raide, il n'a pas été possible d'utiliser le même pas h sans prendre de précaution. Quand on emploie un pas trop grand, la méthode fournit des valeurs non admissibles (des fractions massiques hors de l'intervalle $[0,1]$ ou des températures négatives). Afin d'éliminer ce problème, on a mis au point une procédure de contrôle du pas d'espace h . Notons que si W_j est admissible, il en est de même pour la valeur de W_{j+1} obtenue si le pas h est suffisamment petit.

Ainsi, chaque fois que la prédiction de W_{j+1} est non admissible, on divise le pas h en deux et on calcule une nouvelle prédiction correspondante à ce pas $h/2$. De plus, afin d'éviter d'utiliser de trop petits pas lorsque cela n'est plus nécessaire, on tente de doubler le pas après dix itérations successives avec le même h . Le pas initial est 10^{-6} , le pas maximum est de l'ordre de 10^{-2} (fig. g4). Dans nos calculs nous avons utilisé successivement les pas : $0,1 \times 10^{-5}$; $0,1 \times 10^{-4}$; $0,1 \times 10^{-3}$ et $0,1 \times 10^{-2}$.

Cette méthode permet de n'utiliser que 150 points de discrétisation et de placer ces points dans les zones où cela est nécessaire.

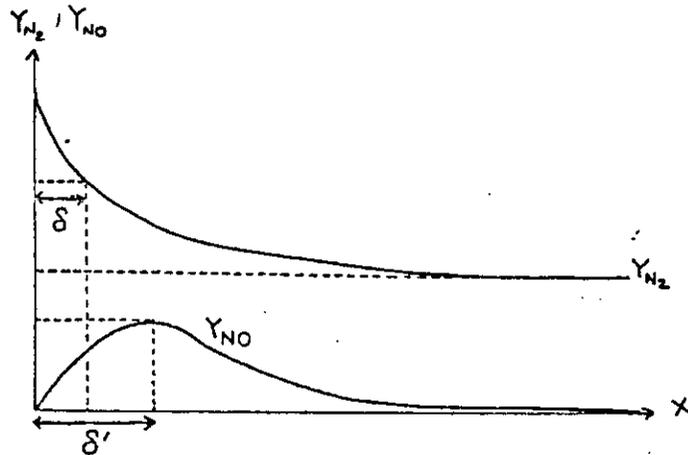
Les solutions obtenues pour des nombres de Mach de 15, 20 et 25 sont présentées (fig. g5, g6 et g7).

On constate, à $M_\infty = 25$ (fig. g5), que les phénomènes très rapides sont localisés immédiatement derrière le choc. La température varie brutalement de 28000 à 15000 °k puis atteint lentement la valeur d'équilibre de 7833 °k la dissociation de N_2 est très importante et elle produit essentiellement de l'azote monoatomique N, le monoxyde d'azote NO étant présent en très petite quantité à l'état d'équilibre. La dissociation de O_2 est complète et se produit en moins de 0.5cm.

La production d'oxygène monoatomique O est importante mais N est, dans ce cas, l'espèce produite dominante.

A $M_\infty = 20$ (fig. g6), les phénomènes sont moins violents que dans le cas précédent. La température derrière le choc étant plus faible que pour $M_\infty = 25$ (18000 °k au lieu de 28000 °k), les phénomènes chimiques sont différents. La dissociation de N_2 est moins importante et elle ne produit plus exclusivement de N; NO est présent en quantité non négligeable. La dissociation de O_2 est complète mais elle s'effectue, à présent sur 1cm, la quantité d'oxygène O créée est presque identique au cas précédent, devient l'espèce produite majoritaire.

A $M_\infty = 15$ (fig. g7), les phénomènes sont moins importants. La variation totale de la température est d'environ 4000 °k (de 10000 à 6000 °k) la dissociation de N_2 , très faible, produit du NO dont la quantité est importante ; N n'est présent qu'à l'état de trace. O_2 n'est plus complètement dissocié mais la quantité d'oxygène O produite est très proche des deux cas précédents et elle demeure l'espèce produite dominante. Les valeurs des températures d'équilibre sont comprises entre (6105 °k et 7833 °k), ce qui représente pour $M_\infty = 25$, une baisse de 20000 °k par rapport à la valeur initiale à l'aval du choc, en $X=0$. A titre d'illustration, on peut calculer des longueurs caractéristiques de réaction et de relaxation : δ et δ' . δ est la distance nécessaire à Y_{N_2} pour être réduite de moitié et δ' est la distance nécessaire à Y_{NO} pour atteindre son maximum.



Les valeurs approximées de δ et δ' pour différentes valeurs du nombre de mach

M_∞	δ	δ'
25	1.10^{-4}	8.10^{-4}
20	5.10^{-4}	3.10^{-3}
15	7.10^{-3}	3.10^{-2}

Table IV-1

Afin de voir l'influence des paramètres d'entrée sur la distribution des températures et des fractions massiques, on a tracé les figures g12 et g13, où on a pris différentes valeurs du nombre de Mach infini (10 à 30). On remarque qu'il y a deux phases. Dans une première phase représentant l'avancement (x) au dessous de 10^{-4} du choc, la dissociation de O_2 n'est pas totale et l'équilibre chimique est hors d'atteinte, ensuite une phase où la température croit lentement et la dissociation de O_2 est totale, alors plus on augmente le nombre de Mach plus on favorise la dissociation de O_2 .

Sur les figures (g14,g15,g16 et g17) on a essayé de montrer l'évolution chronologique de la production des espèces ($O, NetNO$) à des pas d'espace. On

constate que pour un nombre de Mach égale à 10 la dissociation de N_2 n'a pas encore eu lieu, ceci s'explique par la faible température ($T \cong 4000$ °K) ceci laisse entendre qu'à Mach 10 le gaz peut être considéré figé. D'autre part, pour un nombre de Mach infini au dessus de 15, la dissociation de N_2 est très importante, même si elle n'est pas totale.

IV.4.3. Méthode explicite :

On a utilisé 300 pas d'espace sur une longueur de 10cm, pour notre application, on a pris un temps maximale autorisé obtenue pour un nombre de C.F.L de l'ordre de 0,2. En effet pour notre modèle d'équation, la limite de stabilité du schéma explicite s'écrit [13]:

$$\frac{V \cdot \Delta t}{\Delta X} \leq \frac{1}{1 - \frac{\lambda \Delta X}{2V}}$$

Cette formule montre qu'une condition nécessaire de stabilité est $\lambda \leq \frac{2V}{\Delta X}$

ainsi le terme $\frac{V}{|\lambda \Delta X}$ par définition est le nombre de C.F.L. Les premiers essais ont fait apparaître des instabilités dues au départ impulsives, produisant en particulier, des prédictions de température négative. Chaque fois que cela s'est produit, on a

simplement écarté cette prédiction, cette dernière est remplacée par: $T_j^{n+1} = \frac{T_j^n}{2}$

Cet artifice disparaît après quelques i térations et n'affecte nullement la solution stationnaire.

La convergence i térative est indiquée sur la figure g10, où le résidu est représenté en fonction des i térations.

On remarque que la convergence vers l'état stationnaire prend du temps à s'établir.

On peut remarquer sur les figures g9-a et g9-b qu'à l'état stationnaire, les solutions des deux ordres (un et deux) sont identiques à celles obtenues précédemment.

IV.4.4. Méthode implicite :

Les calculs sont effectués dans les mêmes conditions que pour le schéma explicite, c'est à dire avec le même nombre de points de discrétisation (300), avec les mêmes conditions initiales et le même contrôle de température.

Le schéma implicite est inconditionnellement stable. contrairement au schéma explicite, il est possible d'atteindre la solution stationnaire en utilisant de très grands pas de temps, correspondant à un nombre de C.F.L de $3 \cdot 10^5$ et moins de 60 itérations.

Les figures g 11a et g 11b présentent les solutions à l'état stationnaire pour $M_\infty = 25$, en utilisant un schéma décentré d'ordre deux. Les résultats sont identiques à ceux obtenues par application des schémas précédents.

IV.5 Conclusion :

Les résultats que nous avons présenté dans ce chapitre sont issus d'un programme de simulation que nous avons mis au point.

Les résultats présentés et commentés, mettent en évidence l'intérêt de la méthode de Runge-Kutta du point de vue stabilité, d'efficacité et simplicité.

En revanche, la méthode explicite n'est pas très efficace puisqu'elle nécessite l'introduction de conditions initiales convenables et quelque 2500 itérations pour converge vers la solution stationnaire.

Par contre elle devient efficace dans le cas bidimensionnel, contrairement à la méthode de Runge-Kutta qui ne sera plus utilisée.

La methode de Runge-Kutta
Mach 25

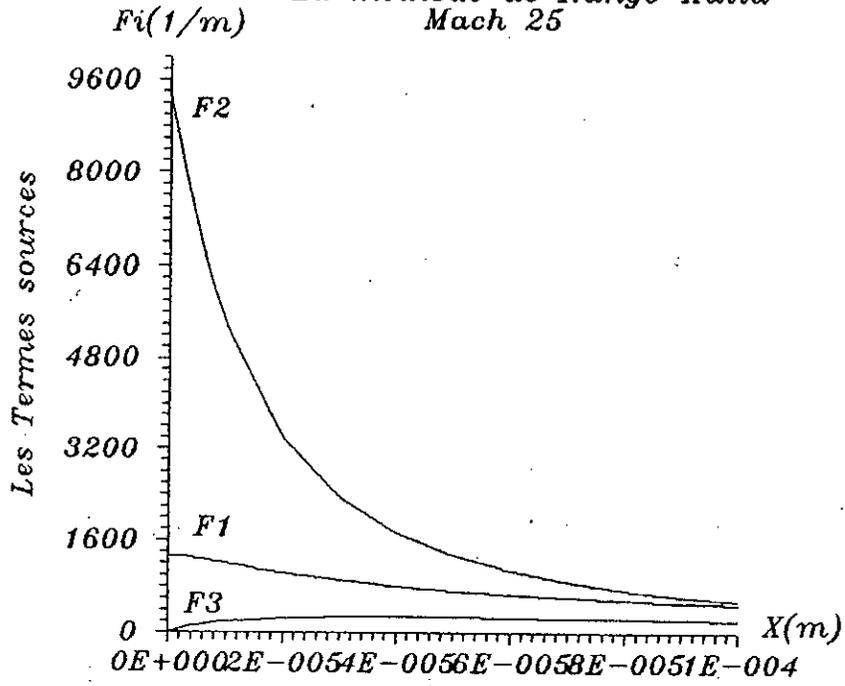


Fig. 91

La methode de Runge-Kutta
Mach 20

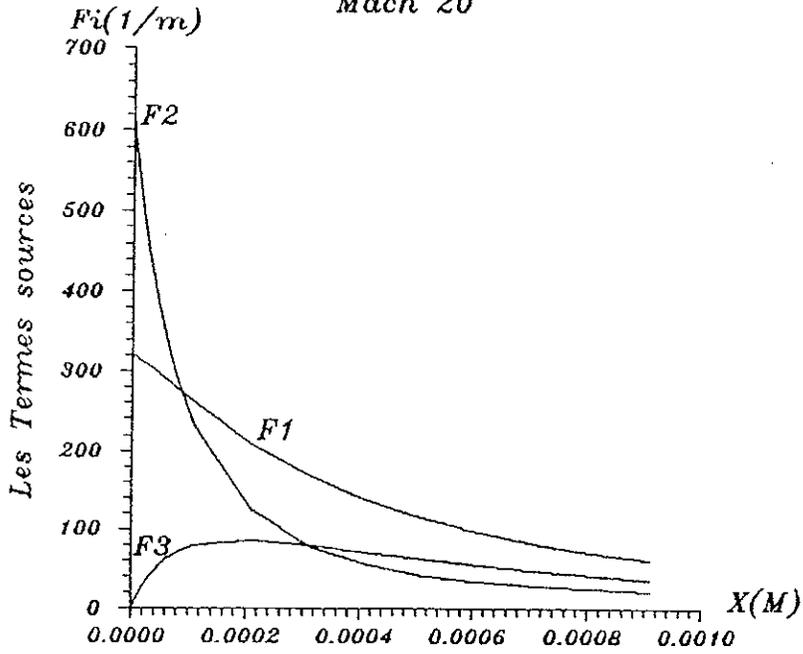


Fig. 92

La methode de Runge-Kutta
Mach 15

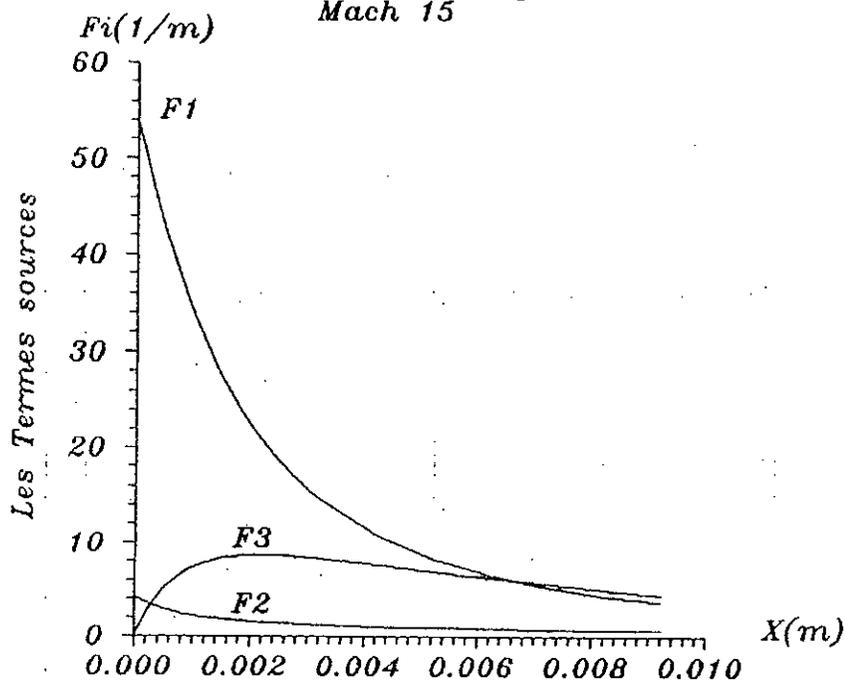
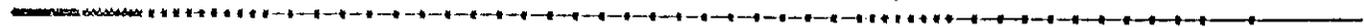
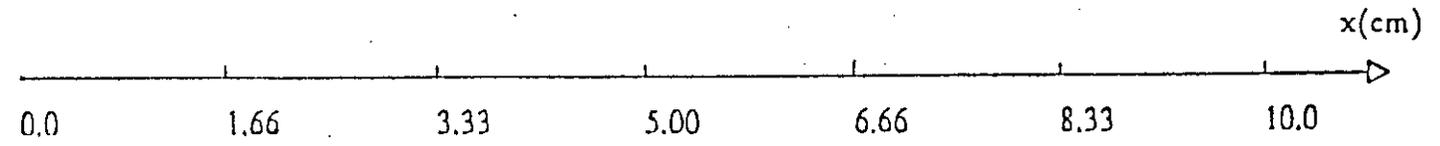


Fig. 9³

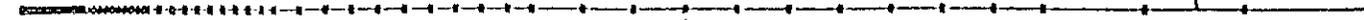
Figure 8



$$h_{min} = 0.1 \cdot 10^{-5} \quad h_{max} = 0.8192003 \cdot 10^{-2}$$



$$h_{min} = 0.1 \cdot 10^{-5} \quad h_{max} = 0.8192003 \cdot 10^{-2}$$



$$h_{min} = 0.1 \cdot 10^{-5} \quad h_{max} = 0.6553602 \cdot 10^{-1}$$

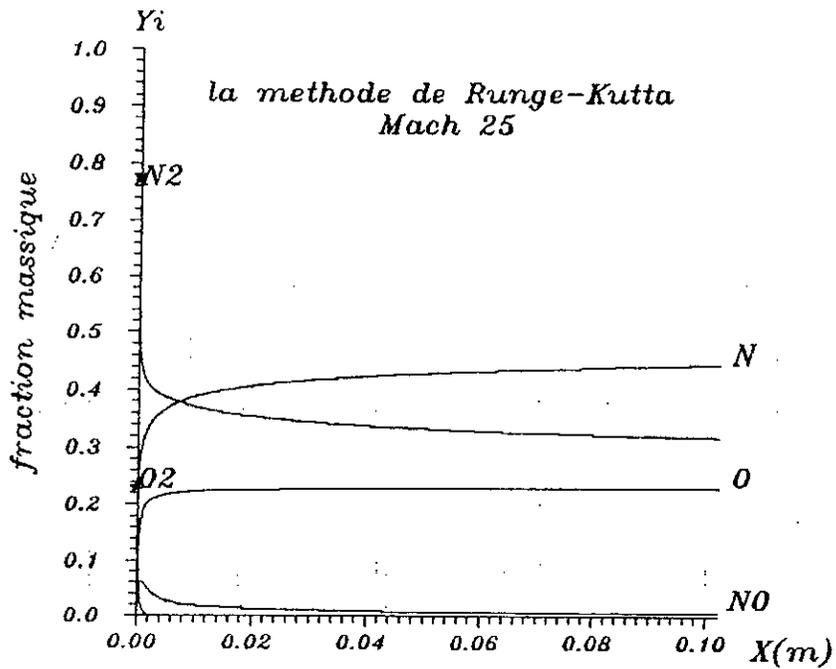


Fig. 95-a

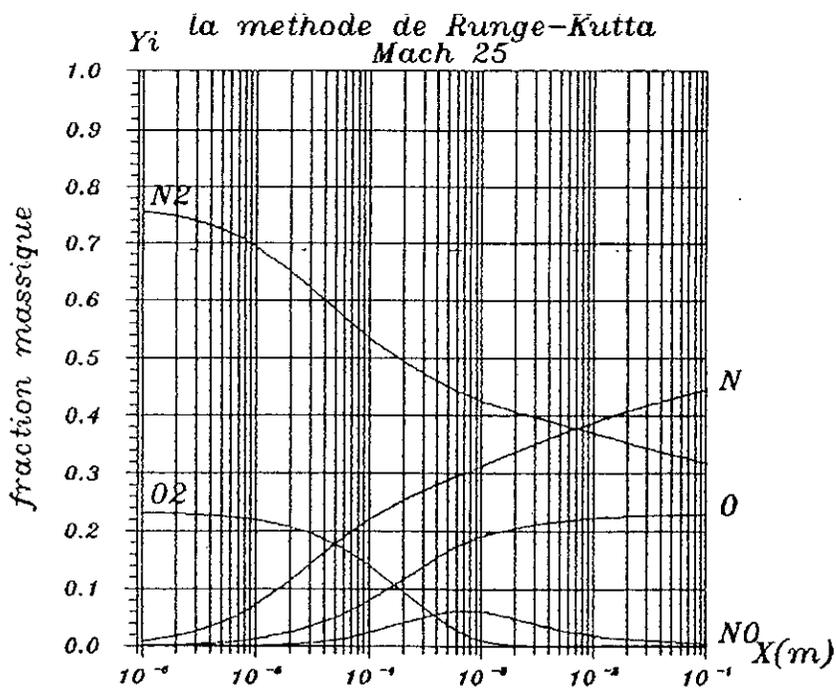


Fig. 95-b

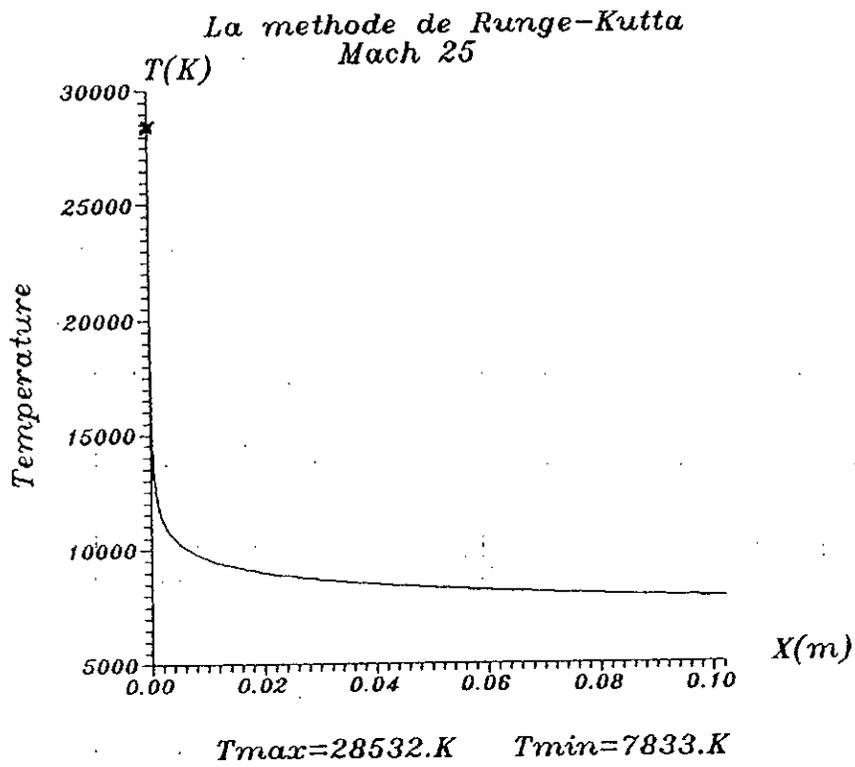


Fig. 95-c

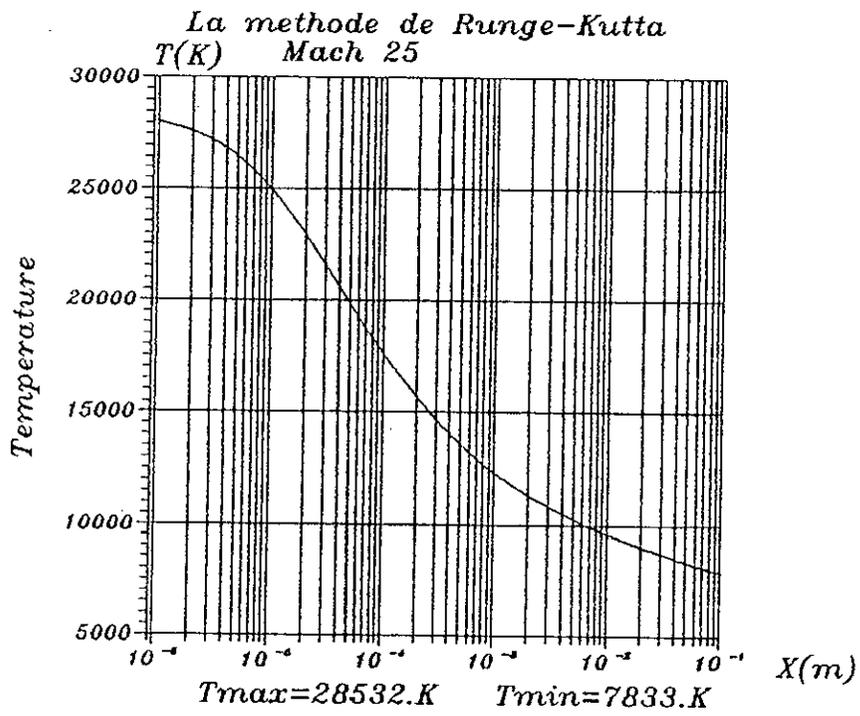


Fig. 95-d

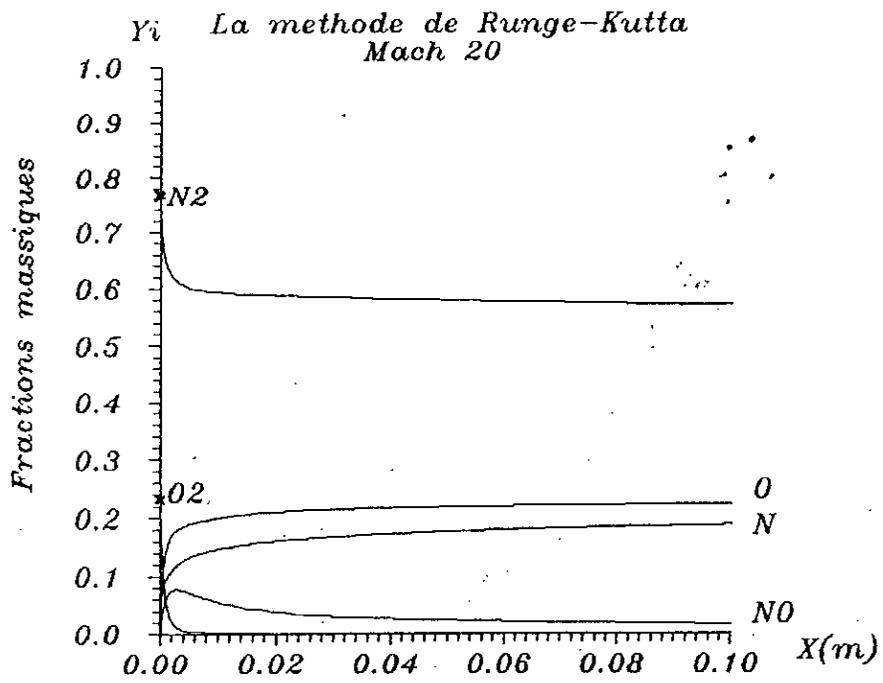


Fig. 96-a

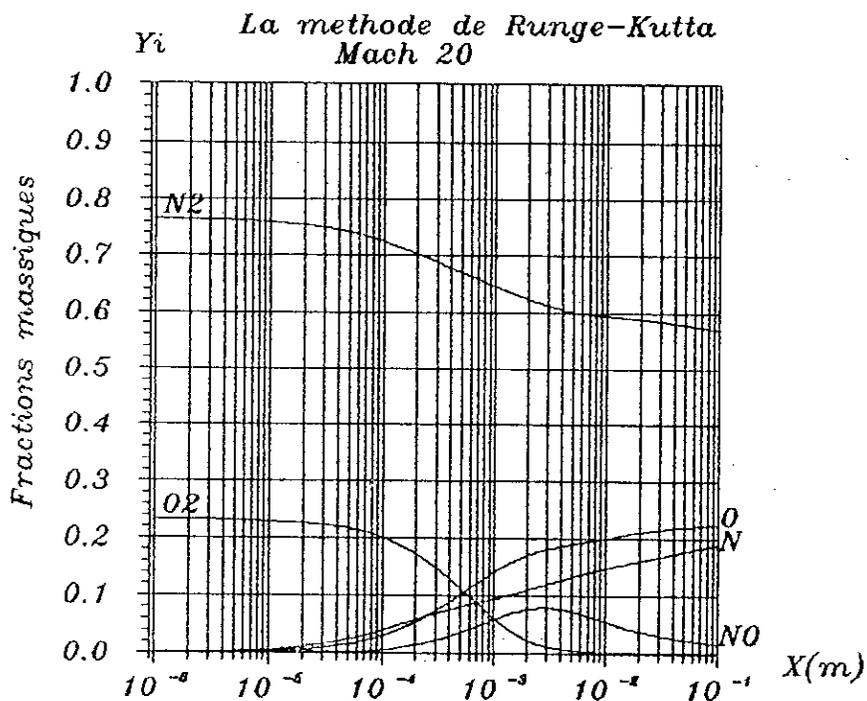


Fig. 96-b

La methode de Runge-Kutta
Mach 20

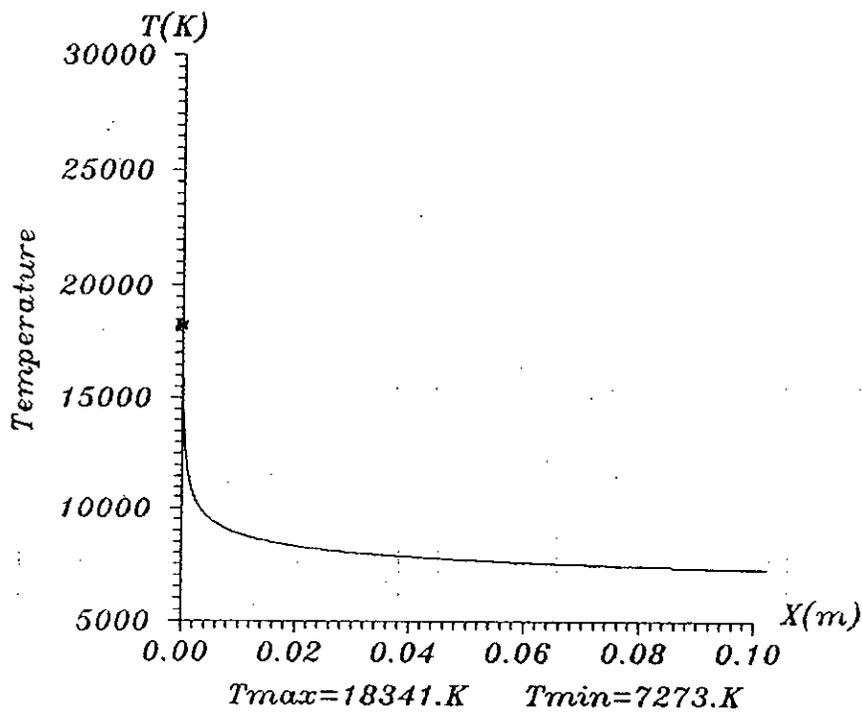


Fig. 96-c

La methode de Runge-Kutta
Mach 20

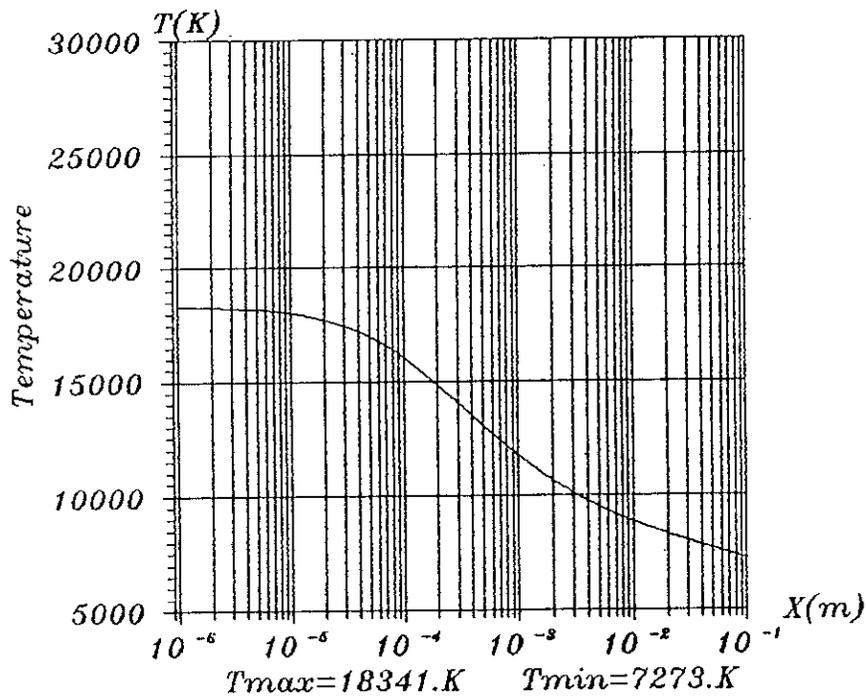
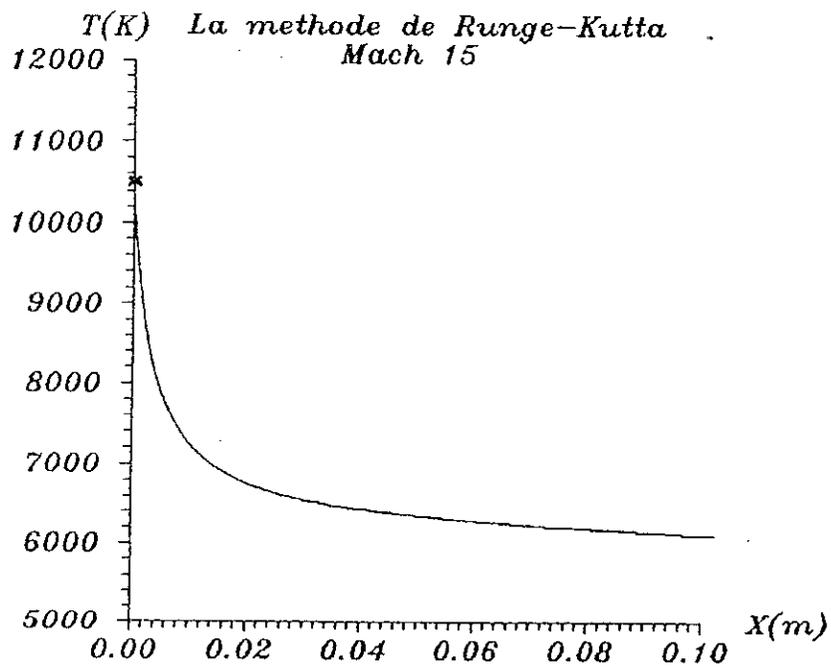
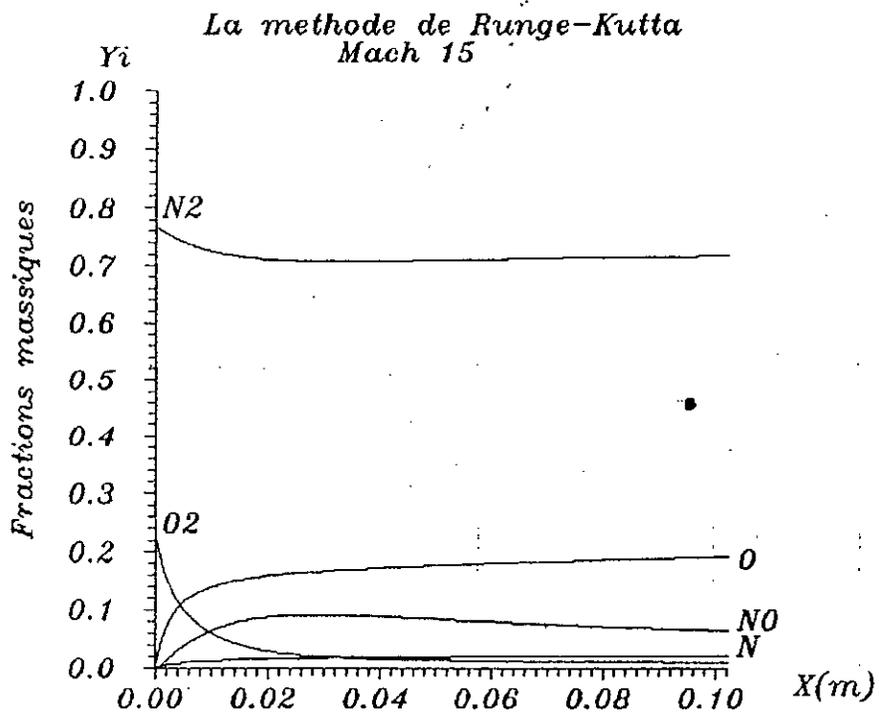


Fig. 96-d



La methode de Runge-Kutta
Mach 15

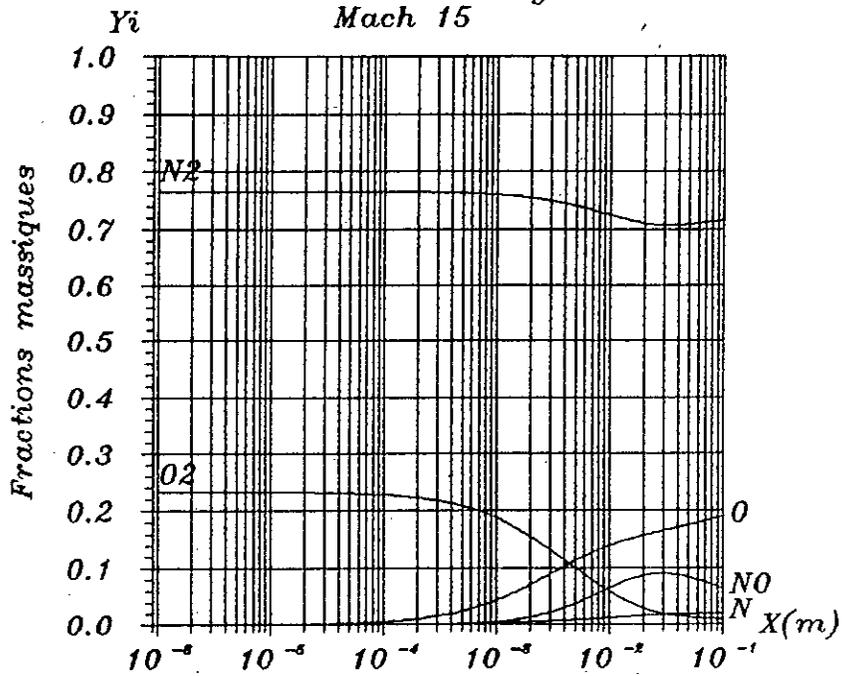
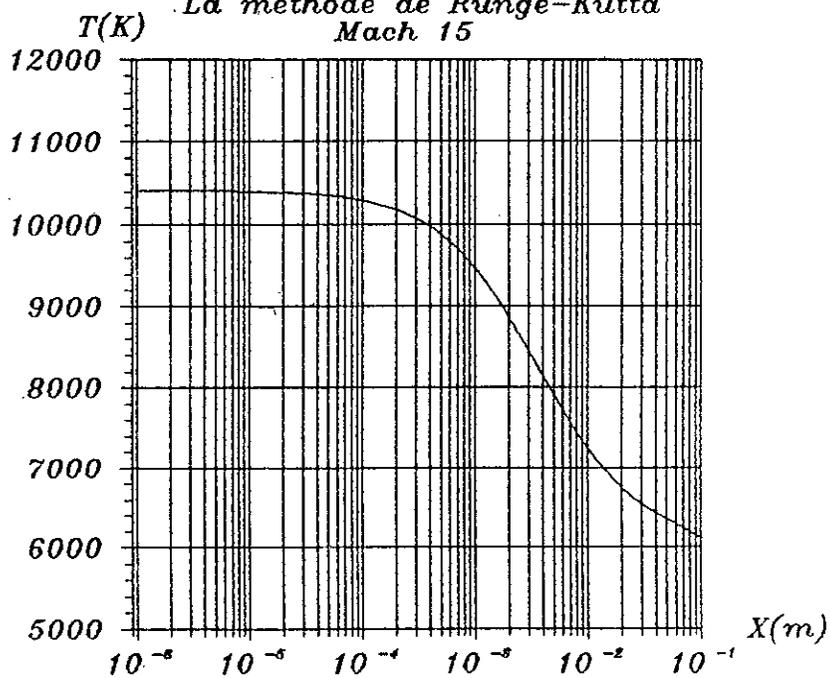


Fig. 97-b

La methode de Runge-Kutta
Mach 15



$T_{max} = 10413.K$ $T_{min} = 6105.K$

Fig. 98-b

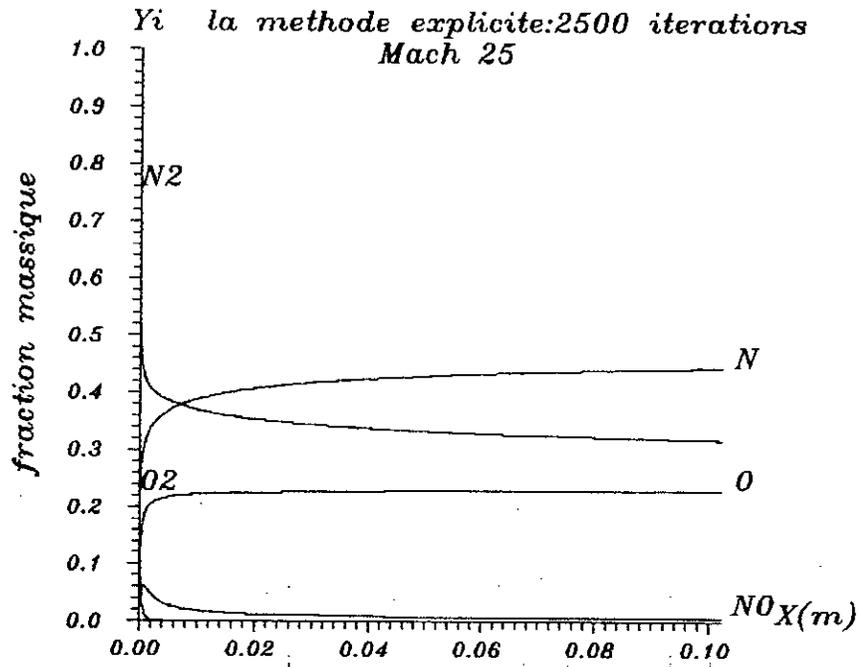
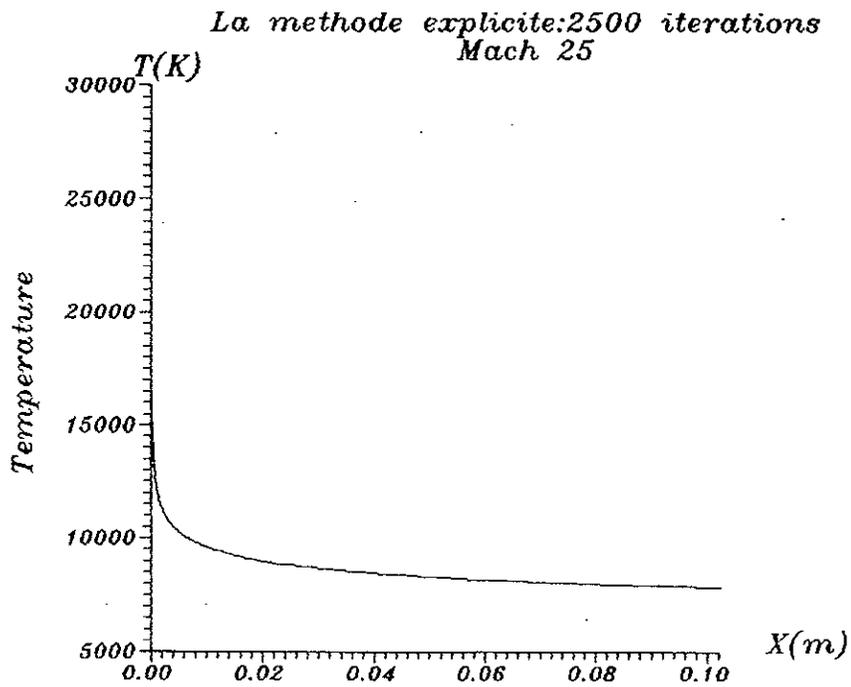


Fig. 9-a



$T_{max}=28532.K$ $T_{min}=7833.K$

Fig. 9-b

Convergence de la methode explicite
Mach 25

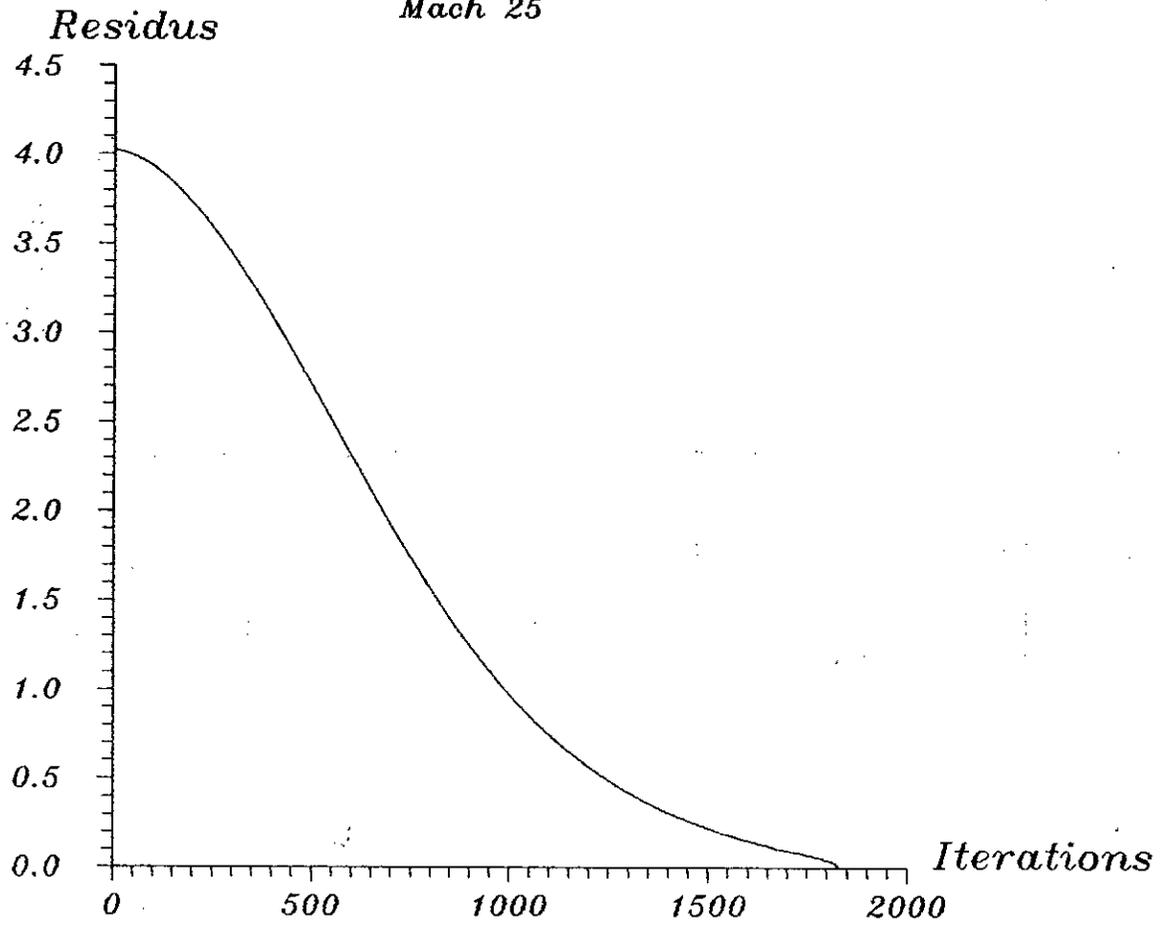
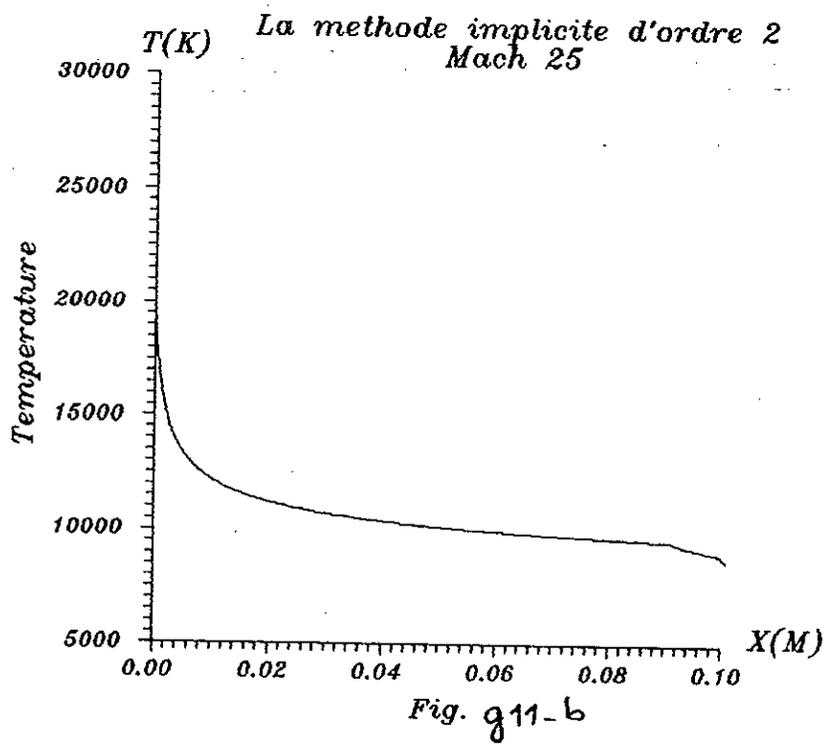
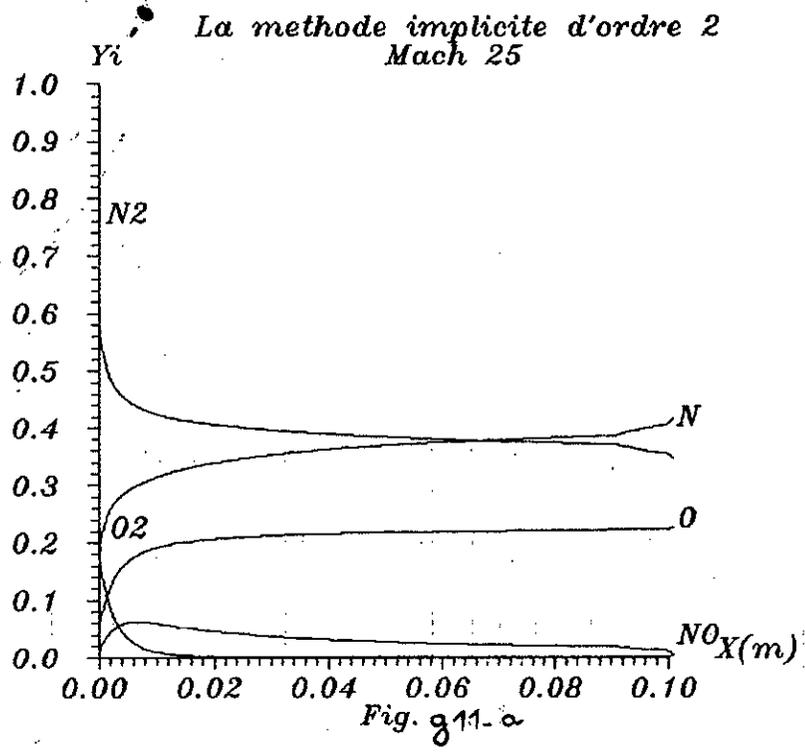


Fig. 9¹⁰



variation de la temperature en fonction
du nombre de Mach a differentes
distances X du choc

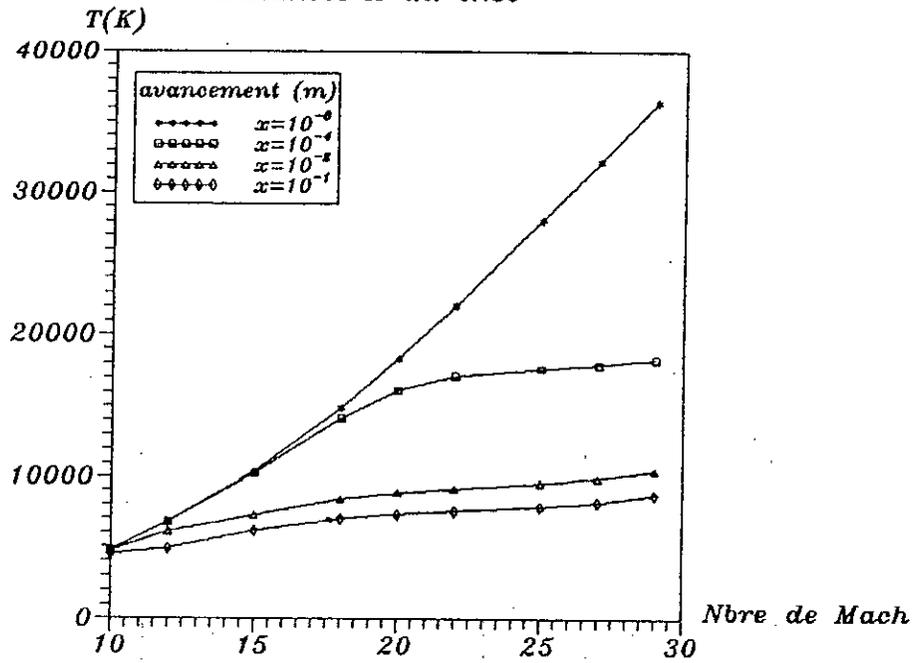


Fig. 912

Variation de la fraction massique de (O) en
fonction du nombre de Mach a differentes
distances X du choc

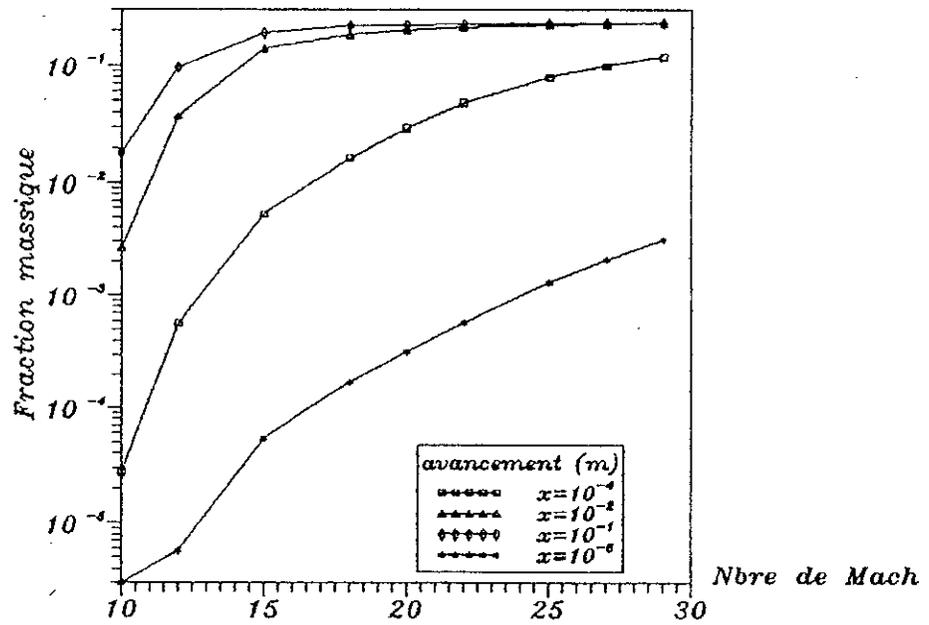


Fig. 913

Variations des fractions massiques O, N, NO en fonction du nombre de Mach q a une distance du choc $X=10^{-8}$

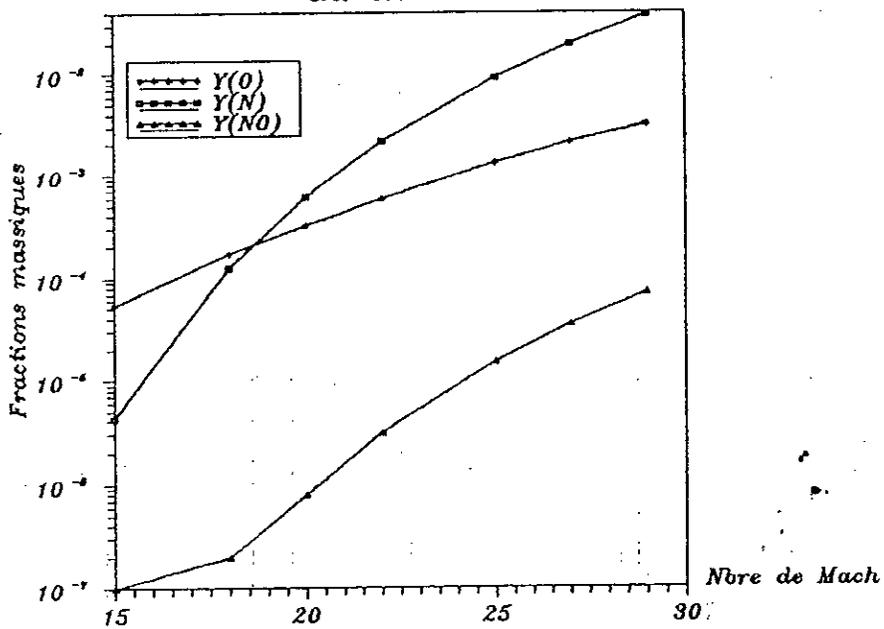


Fig. 914

Variations des fractions massiques O, N, NO en fonction du nombre de Mach q a une distance du choc $X=10^{-7}$

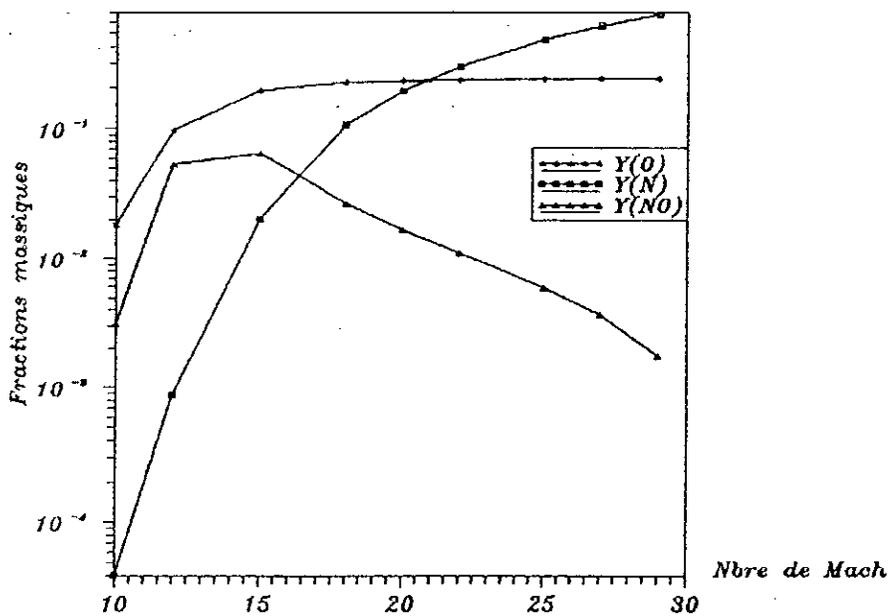


Fig. 915

Variations des fractions massiques O,N,NO en fonction du nombre de Mach \bar{q} a une distance du choc $X=10^{-4}$

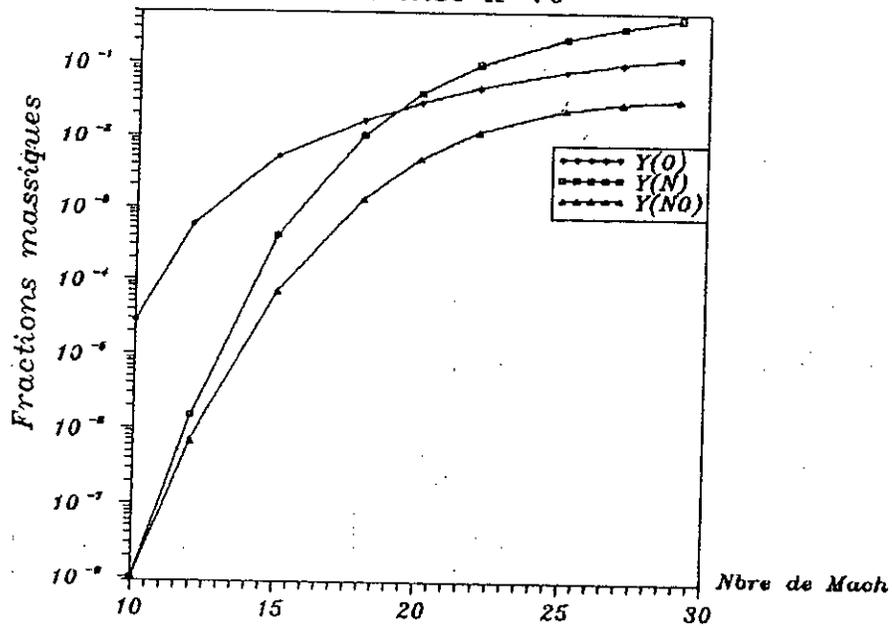


Fig. 916

Variations des fractions massiques O,N,NO en fonction du nombre de Mach a une distance du choc $X=10^{-2}$

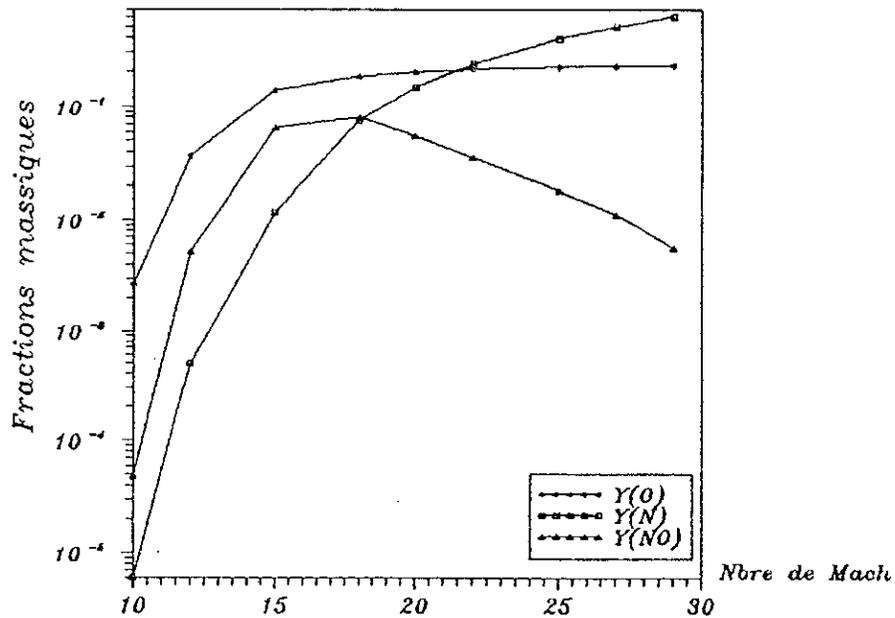


Fig. 917

CONCLUSION

CONCLUSION

On a présenté dans ce travail, l'étude monodimensionnel de l'écoulement hypersonique en non-équilibre chimique pour un mélange de cinq espèces.

Cette étude nous a permis de mettre en évidence les problèmes dues aux phénomènes chimiques seuls qui interviennent dans des modèles plus complexes.

Le problème a été d'abord résolu par une méthode d'avancement en espace, particulièrement bien adaptée à notre écoulement (vitesse constante) puis par deux méthodes d'intégration en temps, explicite et implicite. On a ainsi, pu voir les problèmes numériques qu'entraîne la présence d'échelle de temps, hors de la résolution.

Dans cette étude théorique, nous avons développée un logiciel nous permettant de simuler l'écoulement. Des résultats obtenues, nous avons abouti à des conclusion quant au présence du phénomène pour différentes valeur du nombre de march.

Ces résultats mettent en évidence l'influence de la dissociation chimique sur l'écoulement, ainsi que les paramètres d'entrées sur la dissociation.

En revanche, les perspectives sont nombreuses. Du point de vue physique, il serait intéressant d'introduire la viscosité, les espèces chimiques ionisées ainsi que des phénomènes de relaxation vibrationnelle, on ajoutant aux variables plusieurs températures de vibrations.

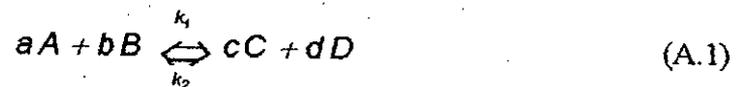
D'un point de vue numérique, une méthode implicite pour les écoulements visqueux permettra d'améliorer les temps de calcul. De plus, il serait intéressant d'étendre l'étude au cas bidimensionnel.

ANNEXES .

ANNEXE A

DETERMINATION DE LA VITESSE DE REACTION

Considérons la réaction chimique J suivante :



Où les grandes lettres désignent les substances et les petites lettres les coefficients stoechiométriques.

Nous avons, à l'équilibre :

$$K_{eq_j}(T) = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

la vitesse molaire globale de la réaction V_j en non-équilibre s'écrit :

$$V_j = V_j^1 + V_j^2$$

où

$$V_j^1 = K_f(T) [A]^a [B]^b$$

$$V_j^2 = -K_r(T) [C]^c [D]^d$$

Soit encore :

$$V_j = K_f(T) [A]^a [B]^b - K_r(T) [C]^c [D]^d \quad (\text{A.2})$$

A l'équilibre chimique on a par définition $V_j = 0$, soit :

$$\frac{K_f(T)}{K_r(T)} = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

$$\frac{K_f(T)}{K_r(T)} = K_{eq_j}$$

D'où

$$K_f(T) = K_r(T) K_{eq_j}(T)$$

Ainsi, l'équation (A. 2) devient

$$V_j = Kr_j(T) \left[Keq_j(T) [A]^a [B]^b - [C]^c [D]^d \right] \quad (\text{A.3})$$

L'équation d'Etats des gaz parfaits, appliquée à A, s'écrit :

$$P_A V = n_A R T$$

Soit :

$$P_A = \frac{n_A}{V} R T$$

La quantité $\frac{n_A}{V}$ est, par définition [A]

D'où

$$P_A = [A] R T$$

On déduit :

$$[A] = P_A (R T)^{-1}$$

D'une part, la pression partielle P_A est donnée par :

$$P_A = \rho_A R_A T = \rho_A \frac{R_0 T}{m_A}$$

D'autre part la densité de la substance A est explicitement exprimée par :

$$\rho_A = \rho Y_A$$

D'où

$$[A] = \left(\rho \frac{Y_A}{m_A} \right)$$

De même on aura pour les autres substances :

$$[B] = \left(\rho \frac{Y_B}{m_B} \right)$$

$$[C] = \left(\rho \frac{Y_C}{m_C} \right)$$

$$[D] = \left(\rho \frac{Y_D}{m_D} \right)$$

Posons $q_i = \frac{Y_i}{m_i}$ dans les expressions des concentrations précédentes, où on obtient des concentrations molaires que l'on utilise dans le reste des calculs, et introduisant les dans l'équation (A.3)

Ainsi, l'équation (A.3), devient :

$$V_j = Kr_j(T) \left[Keq_j(T) (\rho q_A)^a (\rho q_B)^b - (\rho q_C)^c (\rho q_D)^d \right] \quad (\text{A.4})$$

Généralisons pour i substances

$$V_j = Kr_j(T) \left[Keq_j(T) \prod_{i=i_l} (\rho q_i)^{\sigma_{ij}^l} - \prod_{i=i_r} (\rho q_i)^{\sigma_{ij}^r} \right] \quad (\text{A.5})$$

Posons : $V_j = \left(\frac{\partial q_i}{\partial t} \right)_j$ si $i = j$

Où

i_l : représente les espèces présentes dans la partie gauche de la réaction J

i_r : représente les espèces présentes dans la partie droite de la réaction J

LE MODELE DE RAKICH ET AL.

B.1 LISTE DES CONSTANTES UTILES

On reproduit ici les constantes du modèle propose par Rakich et Al. que nous utilisons pour calculer les termes sources dans notre étude monodimensionnelle.

Remarque : l'ensemble, des valeurs citées ci-dessous sont proposées par Rakich et Al.[23]

Table I : on présente pour une réaction J appartenant au modèle de chimie à l'équilibre i. e. : j=1, 2, et 3, les coefficient a_j et les températures $\Delta H_j / R$ intervenant dans le calcul des constantes d'équilibres.

$$K_{eq_j} = (a_{1j} + a_{2j}T + a_{3j}T^2)e^{-\Delta H_j / RT}$$

J	a_{1j}	a_{2j}	a_{3j}	$\Delta H_j / R$
1	28.736	-2.624 E-3	9.89 E-8	59500
2	21.324	-1.23 E-3	1.1091E-7	113000
3	6.1007	-5.105 E-4	2.957E-8	57500

Table-Ia: Constantes d'équilibre

Les autres constantes d'équilibre dépendent des trois premières, comme le montre la table Ib:

j	K_{eq_j}
4	K_{eq_3} / K_{eq_1}
5	K_{eq_2} / K_{eq_3}
6	$K_{eq_1} K_{eq_2} / K_{eq_3}^2$

Table-Ib

Ici j= 1, 2et3 représente les réactions indiquées dans le modèle et i=1,5 indique les espèces agissant comme troisième corps dans la réaction .

Les coefficients de taux inverse sont définis par l'expression:

$$K_{r_j} = \sum_{i=1}^5 K_{ij} q_i, \quad j=1, 3$$

tel que :

$$K_{ij} = b_j T^{l_j} \exp\left(\frac{-D_j / K}{T}\right)$$

j	i	b_j	η_j	$-D_j/k$
1	1	4.14E18	-1	-171.5
	2	4.14E18	-1	-171.5
	3	1.38E18	-1	-171.5
	4	1.38E18	-1	-171.5
	5	1.38E18	-1	-171.5
2	1	9.0E14	0	500
	2	9.0E14	0	500
	3	3.0E14	0	500
	4	3.0E14	0	500
	5	3.0E14	0	500
3	1	1.28E17	-0.5	0
	2	1.28E17	-0.5	0
	3	0.64E17	-0.5	0
	4	0.64E17	-0.5	0
	5	0.64E17	-0.5	0

Table II : les coefficients de taux inverse K_{ij} pour les réactions de trois corps

La Table III représente: les coefficients de taux inverse K_{ij} pour les réactions binaires (i. e. : pour $j=4, 5$ et 6)

j	K_{ij}
4	$1.015 \text{ E}10 \text{ T exp}(-3096/ \text{T})$
5	$1.6 \text{ E}13$
6	0

Table III

Les taux de production des espèces sont représentés dans les tables suivantes:

Rappelons ici que ρ est évalué en g/cm^3 et $(\frac{\partial q_i}{\partial t})_i = V_i$ si $i=j$

$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_1$	$2K_{r1}\rho(Keq_1q_4 - \rho q_1^2)$
$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_3$	$K_{r3}\rho(Keq_3q_3 - \rho q_1q_2)$
$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_4$	$-K_{r4}\rho(Keq_4q_1q_3 - q_2q_4)$
$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_5$	$K_{r5}\rho(Keq_5q_1q_5 - q_2q_3)$
$(\frac{\partial q_2}{\partial t})_2$	$2K_{r2}\rho(Keq_2q_5 - \rho q_2^2)$
$(\frac{\partial q_3}{\partial t})_6$	$2K_{r6}\rho(Keq_6q_4q_5 - q_3^2)$

Table IV

W_1	$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_1 + (\frac{\partial q_1}{\partial t})_3 + (\frac{\partial q_1}{\partial t})_4 - (\frac{\partial q_1}{\partial t})_5$
W_2	$(\frac{\partial q_2}{\partial t})_2 + (\frac{\partial q_1}{\partial t})_3 - (\frac{\partial q_1}{\partial t})_4 + (\frac{\partial q_1}{\partial t})_5$
W_3	$(\frac{\partial q_1}{\partial t})_4 - (\frac{\partial q_1}{\partial t})_3 + (\frac{\partial q_1}{\partial t})_5 - (\frac{\partial q_3}{\partial t})_6$

Table V

Finalement les termes sources sont écrites comme suit:

$$\Omega_i = \overline{m}_i \rho W_i \quad \text{où } i=1,3$$

\overline{m}_i est la masse molaire de l'espèce i

B.2 MATRICE JACOBIENNE Ω

Rakich et Al ont proposé un modèle que nous utilisons pour le calcul du dérivé du terme source Ω' lorsqu'on utilise la méthode implicite pour la résolution de notre système monodimensionnel. Conservant les mêmes relations et les mêmes tables données à l'annexe B, nous calculons la matrice Jacobienne du terme source par rapport aux inconnues

$(\rho_1, \rho_2, \rho_3)^T$. On souhaite calculer pour $s=1,2,3$

$$\frac{\partial \Omega_i}{\partial \rho_s} = \frac{1}{m_i \rho} \frac{\partial W_i}{\partial \rho_s} = \frac{1}{m_i \rho} \frac{\partial W_i}{\partial q_s} \frac{\partial q_s}{\partial \rho_s} = \frac{\partial W_i}{\partial q_s} \quad (1)$$

$$\text{où } q_s = \frac{Y_s}{m_s} \quad \text{et } \rho_s = \rho Y_s \quad s=1,2,3 \quad i=1,2,3$$

Nous ne détaillerons pas le calcul de tous les termes de la matrice, nous exposerons simplement la méthode pour un des termes, par exemple, à partir de la table (VI):

$$\frac{\partial W_1}{\partial q_s} = \frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_1 + \frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_3 + \frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_4 - \frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_5 \quad \text{où } s=1,2,3 \quad (2)$$

D'après les définitions des termes $\left(\frac{\partial q_i}{\partial t} \right)_j$ $i=1,3$ $j=1,6$ données par la table (V), on calcul

les dérivés $\frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_i}{\partial t} \right)_j$. pour illustration donnons l'exemple :

$$\frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_1 = \frac{\partial}{\partial q_s} \left[2Kr_1 \rho (Keq_1 q_4 - \rho q_1^2) \right] \quad (3)$$

Rappelons aussi que:

$$\rho \text{ est évaluée en } g/cm^3 \text{ donc on pose } \rho = \frac{\rho}{1000}$$

$$\frac{\partial}{\partial q_s} \left(\frac{\partial q_1}{\partial t} \right)_1 = 2 \frac{Kr_1}{\partial q_s} \rho (Keq_1 q_4 - \rho q_1^2) + 2Kr_1 \rho \left(q_4 \frac{\partial Keq_1}{\partial q_s} + Keq_1 \frac{\partial q_4}{\partial q_s} - 2\rho q_1 \frac{\partial q_1}{\partial q_s} \right)$$

Il faut d'abords dériver les termes:

$$Kr_j = \sum_{i=1}^5 K_{ji} q_i \quad j=1,3 \quad (4)$$

$$\text{Alors } Kr_1 = \sum_{i=1}^5 K_{1i} q_i$$

$$\text{D'où } \frac{\partial Kr_j}{\partial q_s} = \sum_{i=1}^5 \frac{\partial K_{ji}}{\partial q_s} q_i + \sum_{i=1}^5 K_{ji} \frac{\partial q_i}{\partial q_s} \quad j=1,3 \quad s=1,3$$

On obtiens alors

$$\frac{\partial Kr_1}{\partial q_s} = \sum_{i=1}^5 \frac{\partial K_{1i}}{\partial q_s} q_i + \sum_{i=1}^5 K_{1i} \frac{\partial q_i}{\partial q_s} \quad s=1,2,3$$

$$\text{Les } K_{ii} \text{ sont des fonctions de la température, donc: } \frac{\partial K_{ii}}{\partial q_s} = \frac{\partial K_{ii}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial q_s} \quad (5)$$

Pour calculer les $\frac{\partial q_i}{\partial q_s}$, il faut connaître les relations qui lient q_4 et q_5 aux autres variables, pour cela on utilise les équations de conservation (1-u) et (1-u) défini au chapitre(I)

écrites pour les fractions massiques et on en déduit:

$$\begin{cases} q_4 = \frac{3 \cdot 10^3}{412} - \frac{1}{2} q_1 - \frac{1}{2} q_3 \\ q_5 = \frac{79 \cdot 10^3}{2884} - \frac{1}{2} q_2 - \frac{1}{2} q_3 \end{cases} \quad (6)$$

Et on calcule les termes $\frac{\partial K_j}{\partial T}$ et $\frac{\partial q_i}{\partial q_s}$ tq:

$$\text{pour } i=1,3 \text{ et } s=1,3 \quad \frac{\partial q_i}{\partial q_s} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = s \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

Les autres dérivés sont déduits du système (6).

pour le reste des coefficients de taux inverse K_r , pour les réactions binaires $j=4,5,6$

$$\frac{\partial K_r}{\partial q_s} = \frac{\partial K_r}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial q_s} \quad (7)$$

K_r , dans ce cas sont en fonction de la température seulement (voir table IV)

Il faut ensuite dériver les constantes d'équilibre, qui sont également fonctions de la température aussi:

$$\frac{\partial Keq_j}{\partial q_s} = \frac{\partial Keq_j}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial q_s} \quad j=1,6 \quad (8)$$

$$\text{pour } j=1 \quad \frac{\partial Keq_1}{\partial q_s} = \frac{\partial Keq_1}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial q_s}$$

Pour terminer ce calcul, il faut connaître le gradient de la température, pour cela, on dérive l'équation (I-41), qui pour notre étude monodimensionnelle, ne comprend pas le terme de vibration:

$$E = \frac{1}{2} \rho \|V\|^2 + \sum_{s=1}^3 \rho_s H_s^0 + \sum_{s=1}^5 \rho_s C_{v,s} T$$

$$\frac{\partial T}{\partial q_l} = \frac{\partial T}{\partial \rho_l} \frac{\partial \rho_l}{\partial q_l}$$

$$\text{Et l'on obtient: } \frac{\partial T}{\partial q_l} = \frac{\sum_{s=1}^3 \left(\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} \right) C_{v,s} T + \sum_{s=1}^3 \left(\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} \right) H_s^0}{\sum_{s=1}^5 \rho_s C_{v,s}} \frac{1}{\rho m_l} \quad (9) \quad s=1,5 \quad l=1,5$$

Pour calculer les $\frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l}$ il faut connaître les relations qui lient ρ_s et ρ_4 aux autres variables. Pour

cela on utilise les équations décrites au système (III.19) et l'équation de conservation (I.10) et on déduit:

$$\begin{cases} \rho_4 = \frac{24}{103} \rho - \rho_1 - \frac{8}{15} \rho_3 \\ \rho_5 = \frac{79}{103} \rho - \rho_2 - \frac{7}{15} \rho_3 \end{cases} \quad (10)$$

$$\text{Pour } s=1,3 \text{ et } l=1,3 \quad \frac{\partial \rho_s}{\partial \rho_l} = \begin{cases} 1 & \text{si } s=l \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

Les autres dérivés sont déduits du système (10)

On adopte la même démarche pour dériver chaque terme intervenant dans le calcul du terme source et l'on obtient l'expression de la matrice Ω

BIBLIOGRAPHIE

B I B L I O G R A P H I E

- [1] ANDERSON J. D., Jr., Modern compressible flow with hystorical perspective, Mc Graw hill, NY, 1982
- [2] ANDERSON D.A., TANNERHILL J. C. PLETCHER R. H., Computational fluid mechanics and heat transfert, Himisphere publishing Corp. , Washington N. Y., London, 1984
- [3] BRUN R., COLAS P., GUBERNATIS P., ZEITOUN D., Etude théorique du non-equilibre physico-chimique à l'aval d'un choc fort, Contrat d'étude et de recherche AMD.BA, N°. 5-RDMF 86, Rapport final, juin 1987
- [4] CANDLER G., Mac CORMACK R. W., The computation of hypersonic flows in chemical and thermal nonequilibrium, Third National Aerospace Plane Technology Symposium, paper N°. 107(1987)
- [5] CHABANNAL , Thermodynamique chimique
- [6] CHIANG T.-L. Computation of nonequilibrium Chemically reacting flows in hypersonic flow field, Dissertation for the degree of doctor philosophy in Aerospace Engineering University of Texas, Austun, May 1989
- [7] CAIROUT R., FRIEDERICHS K.O., LEWY H., On the partial difference equations of mathematical physics, IBM J. RES.DEV., vol. 11, pp. 215-234(1967)
- [8] DESIDRI J.A., FEZOU L., GLINSKY N., HETTENA E., PERIAUX J., STOUFFLET B., Hypersonic reactive flow computations around space shuttle like geometries by 3-D upwind finite elements, AIAA paper 89-0657, AIAA 27th Aerospace, AIAA paper 75-835, 1989
- [9] DESIDRI J.A., GLINSKY N., HETTENA E., Hypersonic reactive flow computations, computers and fluids, Vol. 18, No. 2, p.p. 15-182, 1990

Bibliographie

B.2

- [10] DRUMMOND J.P., HUSSAINI H.Y., ZONG T.A., Spectral methods for modeling
- supersonic chemically reacting flow fields,
A.I.A.A. J.24, 1461-1467, 1986
- [11] FREIDERICK R., REDELL, Hypersonic flow research,
Avco corporation, 1962
- [12] GARRIC M., Chimie général, Dunod, 1983, 3 Edition.
- [13] GLINSKY N., Simulation numérique d'écoulement hypersoniques réactifs hors-
équilibre chimique, Thèse de doctorat, Université de Nice sophia-antipolis
- [14] GUBERNATIS P., Ecoulements hypersoniques dissipatifs : modèles physiques et
numériques, applications aux ondes de choc et aux tuyères bidimensionnelles,
thèse de doctorat, université d'Aix-Marseille I, juillet 1989
- [15] JAUMOTTE, Choc et onde de choc, Tome II
- [16] LI C.P., Hypersonic nonequilibrium flow past a sphere at low reynolds numbers,
A.I.A.A. p. 74-173, A.I.A.A. 23th Aerospace science meeting, Washington D.C.,
january 1974
- [17] MORETI G., ABBETT M., A time-dependent computational method for blunt body
flows, A.I.A.A. journal, Vol.4 No.12,
pp.2136-2141 1966
- [18] MORLAES, Cinétique chimique : math. sup.
- [19] OLSON M., Essentiels of engineering fluid mechanics,
3rd Edition, 1981
- [20] OUAHES R., DEVALEZ D., Chimie générale,
O.P.U., Algérie, 1981
- [21] PALPON P., Thermodynamique des états de la matières
- [22] PANNETIER G., Chimie générale- Cinétique chimique
- [23] PARK C., On convergence of computation of chemically reacting flows, A.I.A.A.
paper 85-0247, 1985

- [24] PATANKAR S.V., Numerical heat transfer and fluid flow
(Serie in computational methods in mechanics and thermal sciences, 1981, U.S.A.),
Mc Graw Hill book company, 1982
- [25] PEYRET R., TAYLOR T.D., Computational methods for fluid flow,
(Springer-Verlag, N.Y., 1983)
- [26] RAYZER Y.B., ZEL'DOVICH Y.B., Physics of shock waves and high temperature
hydrodynamics phenomena,
Academic Press, N.Y. 1965
- [27] RAKICH J.V., BAILEY H.E., PARK C., Computation of nonequilibrium 3-D inviscid
flow over blunt nosed bodies flying at hypersonic speeds, A.I.A.A. paper 75-835, 1975
- [28] REBUFFET, Aérodynamique Expérimentale, Tome II, 1966
- [29] SEDILLE, Turbomachine hydraulique et thermique :
Thermodynamique technique, Tome III
- [30] STALKER R.J., Hypervelocity Aerodynamics With chemical
Nonequilibrium
Annual Reviews. Fluid mech. 1989.21: pp. 37-60
- [31] STOUFFLET B., Résolution numérique des équations d'Euler des fluides parfaits
compressibles par des schémas implicites en éléments finis, Thèse de troisième cycle,
Paris VI, 1984
- [32] VAN LEER B., Computational methods for ideal compressible flow, cours VAN -
KARMAN Institute, lecture series 1983-04, Computational fluid dynamic, 1983
- [33] VAN WYLEN G. J., SONTAG R.E., Thermodynamique appliquée
Edition Renouveau Pédagogique, Inc, 1981
- [34] VINCENTI W.G., KRUGER C.H., Jr., Introduction to physical gas dynamics,
R.E. KRIEGER publishing Co., Malabar Florida, 1982
- [35] WALTER J., MOORE, Physical chemistry, 3rd Edition
- [36] Workshop on hypersonic flows for reentry problems.
Co-organised by I.N.R.I.A. Sophia-Antipolis and G.A.M.N.I.-S.M.A.I., January 22-26,
1990, Antibes, Alpes-Maritimes.