## CALCUL D'UN ECOULEMENT SUPERSONIQUE BIDIMENSIONNEL D'UN FLUIDE DIPHASIQUE EN PRESENCE DE CONDENSATION

#### PH. MATHIEU\* et J. J. SMOLDEREN<sup>†</sup>

Faculté des Sciences Appliquées, Université de Liège, 75 rue du Val-Benoît, 4000 Liège, Belgium

#### (Reçu le 25 Octobre 1976)

Résumé—Gtâce au remplacement de l'équation de la cinétique de la condensation d'une vapeur dans un gaz en écoulement stationnaire dans une configuration bidimensionnelle par quatre équations différentielles décrivant la distribution des tailles des particules de la phase condensée, le système d'équations aux dérivées partielles de type hyperbolique gouvernant l'évolution des deux phases peut être résolu numériquement par un schéma aux différences finies de Lax-Wendroff. Les résultats théoriques montrent comment les évolutions des grandeurs physiques de l'écoulement le long des lignes de courant du fluide diphasique, les caractéristiques des zones de nucléation et de croissance des germes de condensat, ainsi que la forme de la ligne d'initiation de la condensation, sont influencées par l'effet bidimensionnel créé par la géométrie de la tuyère.

#### NOMENCLATURE

- *a*, vitesse du son isentropique [m/s];
- A, section droite d'une tuyère faiblement divergente [m<sup>2</sup>];
- $C_p$ , chaleur spécifique'à pression constante [J/kg K];
- $\overline{C_p}$ , chaleur spécifique du fluide diphasique;
- $C_s$ , chaleur spécifique de la phase condensée;
- $C_{p_o}$ , chaleur spécifique du mélange gazeux au réservoir de la tuyère;
- *h*, enthalpie massique [J/kg];
- h, demi-hauteur au col de la tuyère [m];
- $h_p$ , enthalpie massique de la phase condensée;
- *I*, tenseur unité;
- J, taux stationnaire de formation de germes de taille critique par unité de volume  $[m^{-3} \cdot s^{-1}];$
- L, chaleur latente de condensation [J/kg];
- $\dot{m}$ , débit massique total [kg/s];
- M, nombre de Mach  $\lceil V/a \rceil$ ;
- P, pression [Pa];
- q, fraction massique de condensat;
- r, rayon moyen d'une particule [m];
- r, distance entre les parois supérieure et inférieure de la tuyère [m];
- $\bar{r}$ , taille moyenne de la population de particules [m];
- $r^*$ , taille critique d'un germe de condensat [m];
- R, constante d'un gaz [J/mole kg K];
- $\overline{R}$ , constante R généralisée au fluide diphasique;
- s, coordonnée curviligne le long d'une ligne caractéristique [m];
- S, entropie massique [J/kg K];
- $S_i$ , grandeurs définies par les relations (14) à (17), i = 0, 1, 2, 3,

t, temps [s];

- u, composante axiale de la vitesse V [m/s];
- U, vecteur d'état  $(\rho, u, v, P, Z_0, Z_1, Z_2, Z_3);$
- v, composante transversale de la vitesse V [m/s];
- V, vecteur vitesse [m/s];
- x, y, coordonnées cartésiennes dans le plan physique [m];
- X, Y, coordonnées cartésiennes dans le plan transformé [m];
- X, fraction massique;
- $X_{v_o}$ , fraction massique de vapeur au réservoir de la tuyère;
- $y_w$ , ordonnée de la paroi de la tuyère [m];
- $Z_0$ , nombre de particules observées par unité de temps  $[s^{-1}]$ ;
- *Z*<sub>1</sub>, taille moyenne de la distribution des tailles des particules [m];
- $Z_2$ , second moment relatif centré de la distribution des tailles des particules  $[m^2]$ ;
- Z<sub>3</sub>, troisième moment relatif centré de la distribution des tailles des particules [m<sup>3</sup>].

### Symboles grecs

$$\alpha, \qquad = u^2 - a^2;$$

- $\beta$ , = cotan  $\mu = (M^2 1)^{1/2}$ ;
- $\delta$ , grandeur définie par l'équation (28);
- $\mu, \qquad \text{angle entre la direction du vecteur vitesse et} \\ \text{les lignes de Mach adjacentes [deg];}$
- $\rho$ , masse volumique [kg/m<sup>3</sup>];
- $\rho_s,$  masse volumique de la phase condensée;
- $\theta$ , angle entre le vecteur vitesse et l'horizontale [deg];
- $\zeta, = \tan \theta.$

#### Indices

- a, axe de la tuyère;
- *i*, gaz inerte;
- o, réservoir;

<sup>\*</sup>Département du Génie Nucléaire.

<sup>†</sup>Chef du Service d'Aérodynamique Appliquée à l'Université de Liège; Directeur à l'Institut von Karman de Dynamique des Fluides, Rhode-Saint-Genèse, Belgique.

- p, paroi de la tuyère;
- p, particules;
- s, phase condensée;
- s, état de saturation;
- v, vapeur.

#### INTRODUCTION

LE MODÈLE mathématique de la condensation d'une vapeur dans des conditions thermodynamiques éloignées d'un état d'équilibre théorique, établi dans [1, 2], est utilisé pour l'étude des propriétés de la zone de condensation dans un écoulement bidimensionnel stationnaire. Un tel écoulement se rencontre fréquemment dans les applications pratiques. Dans le domaine du Génie Nucléaire par exemple, cette étude peut constituer une première approche simplifiée de la description de l'écoulement du fluide caloporteur dans un réacteur nucléaire lorsqu'il est le siège de changements de phase. L'influence de la présence de gouttelettes de la phase condensée d'une vapeur sur l'écoulement du fluide diphasique entre les aubages d'une turbine couplée à un réacteur nucléaire à eau légère peut être également étudiée en première approximation à partir du modèle de la condensation.

L'étude d'un écoulement diphasique avec transfert de masse entre les phases est également nécessaire pour approcher par voie théorique une application à l'enrichissement isotopique de l'uranium par un procédé aérodynamique proposé par Mathieu [2, 3] et basé sur la réactivité différentielle des isotopes de l'uranium dans une réaction chimique entre l'UF<sub>6</sub> et la phase condensée d'une vapeur lorsque les isotopes de l'UF<sub>6</sub> sont excités sélectivement par un rayonnement laser.

#### MODELE MATHEMATIQUE DE LA CONDENSATION DANS UN ECOULEMENT BIDIMENSIONNEL

Ce modèle est établi dans le cadre des hypothèses générales suivantes: (1) le mélange gazeux obéit à la loi des gaz parfaits et est homogène; (2) il est non conducteur et non visqueux (on ne tient pas compte de la présence des couches limites); (3) les particules sont assimilées à des sphères rigides; (4) il n'y a pas de coalescence entre particules; et (5) la chaleur spécifique des deux phases est indépendante de la température.

D'autres hypothèses plus spécifiques et diverses approximations dans l'établissement du modèle mathématique de la condensation en non-équilibre thermodynamique sont justifiées [4–9] et chiffrées dans [2].

L'étude d'un phénomène de condensation typique au sein d'un écoulement supersonique dans une tuyère unidimensionnelle montre que la taille moyenne des particules de la phase condensée ne dépasse pas le micron de sorte que les glissements de vitesse et les écarts de température entre phases peuvent être négligés [1-3, 5, 10-17]. Dans cette approximation, l'écoulement bidimensionnel plan d'un fluide diphasique, composé d'une suspension de petites particules dans un gaz vecteur, est décrit par le système d'équations suivant:

équation de continuité:  $\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{V} = 0$  (1)

équation du mouvement:  $\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} P = 0$  (2)

équation de l'énergie: 
$$\frac{dh}{dt} - \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dt} = 0$$
 (3)

où V est le vecteur vitesse barycentrique du fluide,  $\rho$  sa masse volumique, h son enthalpie par unité de masse et P la pression dans le gaz. L'opérateur d/dt représente la'dérivée convective:  $(\partial/\partial t) + V \cdot \text{grad}$ .

Ce système comporte quatre équations pour les six inconnues  $\rho$ , u, v, P, T et q où u et v sont les composantes axiale et transversale respectivement de la vitesse V et q est la fraction massique de condensat.

Pour fermer ce système, on utilise une équation d'état du gaz et on établit une équation d'évolution de la variable de progression q caractérisant le degré d'avancement des transformations à l'intérieur du fluide.

L'équation d'état est:

$$\rho(P, T, q) = P/\overline{R}T \tag{4}$$

$$\overline{R} = R_0 - qR_v \tag{5}$$

et

$$R_0 = (1 - X_{v_0})R_i + X_{v_0}R_v \tag{6}$$

où  $R_v$ ,  $R_i$  et  $R_0$  sont les constantes de la vapeur, du gaz inerte et du mélange gazeux au réservoir;  $X_{v_o}$  est la fraction massique de vapeur au réservoir.

Dans (3), l'enthalpie du fluide diphasique est donnée par:

$$h(P, T, q) = X_i h_i + X_v h_v + qh_p$$
  
=  $(1 - X_{v_o})h_i + X_{v_o}h_v + q(h_p - h_v)$   
=  $C_{p_o}T - qL + \text{const.}$  (7)

 $X_i$  et  $X_v$  sont les fractions massiques de gaz inerte et de vapeur respectivement;  $h_i$ ,  $h_v$  et  $h_p$  sont les enthalpies massiques du gaz inerte, de la vapeur et de la phase condensée respectivement.  $C_{p_o}$  est la chaleur spécifique du mélange gazeux au réservoir et L est la chaleur latente de condensation par unité de masse, à savoir:

$$C_{p_o} = (1 - X_{v_o})C_{p_i} + X_{v_o}C_{p_v}$$
 et (8)

$$L(T) = h_v(T) - h_p(T) \tag{9}$$

où  $C_{p_i}$  et  $C_{p_v}$  sont les chaleurs spécifiques du gaz inerte et de la vapeur respectivement. Après quelques manipulations élémentaires à partir de (3), (7), (4) et (5), on obtient:

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} - a^2 \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = -\rho a^2 \left(\frac{R_v}{\bar{R}} - \frac{L}{\bar{C}_p T}\right) \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} \qquad (10)$$

où on a posé

$$a^{-2} = \left(\frac{1}{\overline{R}} - \frac{1}{\overline{C_p}}\right) \frac{1}{T}.$$
 (11)

 $\overline{C_p}$  est la chaleur spécifique du fluide diphasique donnée par:

$$\overline{C_p} = C_{p_o} + q(C_S - C_{pv})$$

où  $C_8$  est la chaleur spécifique de la phase condensée.

On vérifie aisément que *a* est la vitesse du son "gelée" dans le fluide diphasique, à savoir:

$$a^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} \bigg|_{\mathbf{S},q}, \quad [2, 18, 19]$$

Pour fermer le système (1), (2), (10) et (4), on utilise l'expression du taux d'accumulation de masse de condensat, établie dans une configuration unidimensionnelle [1-3, 5, 12-17, 20-22], à savoir:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{4\pi\rho_s}{3} \left\{ \frac{J}{\rho} r^{*3} + 3\frac{1}{\dot{m}} \frac{dr}{dt} \int_{x_s}^x r^2(x, x') J(x') A(x') dx' \right\}$$
(12)

où J est le taux de nucléation stationnaire de germes de taille critique  $r^*$  [23, 24], r(x, x') est la taille d'un germe apparu à la position x' et observé en x le long d'une ligne de courant,  $\rho_s$  est la masse volumique de la phase condensée,  $\dot{m}$  le débit massique total, A la section droite d'une tuyère unidimensionnelle, x est le point courant de calcul,  $x_s$  la position où la vapeur atteint un état de saturation théorique (J = 0) et dr/dtest la loi de croissance des germes lorsque le phénomène de condensation est contrôlé par le processus de bombardement cinétique des molécules de gaz sur les germes [2, 3, 5, 6, 13, 15, 17, 20, 23, 25–28].

Les expressions de J,  $r^*$  et dr/dt sont des expressions algébriques des grandeurs thermodynamiques locales. Il s'ensuit que dq/dt est une expression algébrique de ces grandeurs également et ne dépend donc pas des dérivées de ces grandeurs.

Le système (1), (2), (10) est donc entièrement semblable à celui qui régit l'écoulement d'un gaz parfait [29], sauf qu'il est non homogène et que la vitesse du son gelée a dépend de q. Il est donc de nature hyperbolique dans les parties supersoniques de l'écoulement. De plus, les directions des lignes caractéristiques de ce système ont les mêmes expressions que dans le cas d'un gaz parfait. Dans le modèle choisi, la présence de particules et de phénomènes de transfert entre les phases ne changent donc rien à la nature du système d'équations. Celui-ci peut donc être traité numériquement, soit par la méthode classique des caractéristiques, soit par un schéma aux différences finies.

Le calcul numérique de q par (12) est singulièrement compliqué du fait que la taille r(x, x') dépend de l'histoire de la condensation et est elle-même donnée par l'expression suivante:

$$r(x, x') = r^{*}(x') + \int_{x'}^{x} \frac{dr}{d\xi} d\xi.$$
 (13)

Le calcul de q en x nécessite donc la mémorisation des valeurs de r(x, x') en tous les points x' antérieurs à x ( $x_s \le x' \le x$ ) pour chaque position x de calcul.

Cette technique de calcul, bien que numériquement réalisable, est très lourde en ce sens qu'elle entraîne une occupation de mémoires et un temps de calcul d'autant plus importants que les pas d'intégration doivent être petits pour suivre les évolutions rapides de l'intégrand dues à la présence de J. Dans le cas bidimensionnel, les équations (12) et (13) étant écrites le long d'une ligne de courant du fluide, pour atteindre une précision donnée, il faut augmenter le nombre de ces lignes, inconnues à priori, pour quadriller au mieux le domaine bidimensionnel de calcul. Les points de calcul sur ces lignes ne se disposant pas sur un maillage régulier, les problèmes d'interpolation et d'exploitation des résultats deviennent pratiquement inextricables. Enfin, le contrôle de la précision dans tout le champ devient pratiquement impossible.

L'artifice développé dans [1-3] consistant à remplacer l'équation (12) par quatre équations différentielles le long des lignes de courant, ne contenant plus d'intégrale, permet de traiter numériquement le problème par un schéma aux différences finies.

L'équation (12) est ainsi remplacée par le système différentiel suivant:

$$\rho \frac{dZ_0}{dt} = \rho \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} Z_0 = \dot{m} J \equiv S_0 \tag{14}$$

$$\rho \frac{dZ_1}{dt} = \rho \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} Z_1$$
$$= \rho \frac{dr}{dt} + \dot{m} \frac{J}{Z_0} \left( r^* - Z_1 \right) \equiv S_1$$
(15)

$$\rho \frac{dZ_2}{dt} = \rho \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} Z_2$$
$$= \dot{m} \frac{J}{Z_0} \left[ (r^* - Z_1)^2 - Z_2 \right] \equiv S_2$$
(16)

$$\rho \frac{dZ_3}{dt} = \rho \mathbf{V} \cdot \text{grad} \, Z_3$$
  
=  $\dot{m} \frac{J}{Z_0} \left[ (r^* - Z_1)^3 - 3(r^* - Z_1) Z_2 - Z_3 \right]$   
=  $S_3$  (17)

- $Z_0$  est le nombre de particules observées à une position donnée par unité de temps,
- $Z_1$  est leur taille moyenne,  $Z_2$  et  $Z_3$  sont respectivement les second et troisième moments relatifs centrés de la distribution des tailles des particules de la phase condensée et quantifient respectivement la dispersion et la distortion de celle-ci.

On a: 
$$Z_1 = \overline{r}$$
,  $Z_2 = \overline{(r-\overline{r})^2}$  et  $Z_3 = \overline{(r-\overline{r})^3}$ .

La fraction massique de condensat est alors donnée par:

$$q = \frac{4\pi\rho_s}{3\dot{m}} Z_0 [Z_3 + 3Z_1 Z_2 + Z_1^3].$$
(18)

Les équations de conservation stationnaires pour le fluide diphasique s'écrivent alors sous forme quasilinéaire comme suit:

$$V \cdot \operatorname{grad} \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{V} = 0 \tag{19}$$

$$(\mathbf{V} \cdot \operatorname{grad})\mathbf{V} + \frac{1}{\rho}\operatorname{grad} P = 0$$
 (20)

$$\mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} P - a^2 \mathbf{V} \cdot \operatorname{grad} \rho = -\rho a^2 \left( \frac{R_v}{\overline{R}} - \frac{L}{\overline{C_p} T} \right) \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} \quad (21)$$

$$V \cdot \text{grad} Z_i = S_i / \rho, \quad i = 0, 1, 2, 3$$
 (22)

avec

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{4\pi\rho_s}{3} \frac{1}{\rho} \{ (Z_3 + 3Z_1Z_2 + Z_1^3)S_0 + 3Z_0(Z_2 + Z_1^2)S_1 + 3Z_0Z_1S_2 + Z_0S_3 \}.$$
 (23)

Exprimé en composantes cartésiennes, le système (19)-(23) se met sous la forme matricielle suivante:

$$A\mathbf{U}_{\mathbf{x}} + B\mathbf{U}_{\mathbf{y}} = \mathbf{t} \tag{24}$$

où le vecteur d'état U a comme composantes:  $\rho$ , u, v, P,  $Z_3$ ,  $Z_2$ ,  $Z_1$ ,  $Z_0$  et où les matrices A et B, carrées et de dimension  $8 \times 8$ , s'obtiennent aisément à partir de la morphologie du système.

Pour traiter numériquement ce système par un schéma aux différences finies, on le transforme comme suit:

$$\mathbf{U}_{\mathbf{x}} = -R\mathbf{U}_{\mathbf{y}} + \mathbf{T} \tag{25}$$

où  $R = A^{-1}B$  et  $T = A^{-1}t$  et où x est la variable "évolutive" du problème bidimensionnel stationnaire plan. Les valeurs propres de R sont les directions caractéristiques du système (19)–(23) et représentent les pentes des lignes de courant du fluide et des lignes de Mach dans le gaz.

Comme le maillage rectangulaire est le plus adéquat pour une systémisation du calcul et pour la programmation d'un algorithme aux différences finies, on transforme le domaine physique (x, y) de l'écoulement en un domaine rectangulaire par le changement de variables suivant [30]:

$$X = x$$
  

$$Y = [y - y_i(x)]/r(x) \text{ avec } r(x) = y_s(x) - y_i(x)$$
(26)

où  $y_i(x)$  et  $y_s(x)$  représentent les équations des frontières inférieure et supérieure du domaine physique respectivement. A partir du Jacobien de la transformation (26), on obtient:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial X} - \frac{1}{r(X)} \delta(X) \frac{\partial}{\partial Y} \text{ et } \frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{r(X)} \frac{\partial}{\partial Y} \quad (27)$$

avec

$$\delta(X) = \frac{\mathrm{d}r(X)}{\mathrm{d}X} Y + \frac{\mathrm{d}y_i(X)}{\mathrm{d}X}.$$
 (28)



FIG. 1. Maillage rectangulaire du schéma de Lax-Wendroff à un pas.

Le système (25) devient dans le plan transformé:

$$\mathbf{U}_{\mathbf{X}} = D\mathbf{U}_{\mathbf{Y}} + \mathbf{T} \tag{29}$$

avec  $D = (1/r)(\delta I - R)$  où I est la matrice unité.

Comme les équations (22) décrivant le nuage particulaire sont découplées des équations (19)-(21) décrivant la phase gazeuse, on peut décomposer (29) en deux systèmes séparés. La partie des équations gouvernant la phase gazeuse est alors décrite par:

$$D \equiv \frac{1}{r} \begin{bmatrix} \delta - \frac{v}{u} & \rho \frac{v}{\alpha} & -\rho \frac{u}{\alpha} & \frac{-v}{u\alpha} \\ 0 & \delta - \frac{uv}{\alpha} & \frac{a^2}{\alpha} & \frac{v}{\rho\alpha} \\ 0 & 0 & \delta - \frac{v}{u} & -\frac{1}{\rho u} \\ 0 & \rho a^2 \frac{v}{\alpha} & -\rho a^2 \frac{u}{\alpha} & \delta - \frac{uv}{\alpha} \end{bmatrix}$$
  
et  $\mathbf{T} = \begin{bmatrix} -f \frac{a^2}{\alpha u^2} S_3 \\ f \frac{a^2}{\alpha u} \frac{S_3}{\rho} \\ 0 \\ -f \frac{a^2}{\alpha} S_3 \end{bmatrix}$  (30)

avec

$$\alpha = u^2 - a^2 \text{ et } f = \frac{4\pi\rho_s}{3} u \left(\frac{R_v}{\overline{R}} - \frac{L}{\overline{C_p}T}\right)$$

L'expression de D est tout à fait semblable à celle obtenue dans le cas d'un gaz parfait [29, 31].

La partie des équations gouvernant le nuage particulaire s'écrit alors:

$$\frac{\partial Z_i}{\partial X} = \left(\delta - \frac{v}{u}\right)\frac{\partial Z_i}{\partial Y} + \frac{S_i}{\rho u}, \quad i = 0, 1, 2, 3.$$
(31)

#### TRAITEMENT NUMERIQUE

On a calculé numériquement le champ U par le schéma de Lax-Wendroff à un pas. Ce schéma est explicite et du second ordre en précision sur les deux variables x et y [31-33].

La formulation de l'équation (12) sous forme des quatre équations différentielles (14)–(17) permet l'utilisation de ce schéma; son grand avantage sur les plans de la programmation, de l'occupation des mémoires et du temps de calcul sur ordinateur, est qu'il ne nécessite la connaissance du champ à calculer sur un front X que sur le front immédiatement précédent  $X - \Delta X$ . Son inconvénient principal est qu'il demande un travail préparatoire important.

L'algorithme est le suivant:

$$\mathbf{U}_{J}^{I+1} = \mathbf{U}_{J}^{I} + \Delta X \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial X}\right)_{J}^{I} + \frac{(\Delta X)^{2}}{2} \left(\frac{\partial^{2} \mathbf{U}}{\partial X^{2}}\right)_{J}^{I} \quad (32)$$

1006

soit encore:

$$\mathbf{U}_{J}^{I+1} = \mathbf{U}_{J}^{I} + \Delta X [D\mathbf{U}_{Y}]_{J}^{I} + \frac{(\Delta X)^{2}}{2} [DD\mathbf{U}_{YY} + DD_{Y}\mathbf{U}_{Y} + D_{X}\mathbf{U}_{Y}]_{J}^{I} + \Delta X \mathbf{T}_{J}^{I} + \frac{(\Delta X)^{2}}{2} [D\mathbf{T}_{Y} + \mathbf{T}_{X}]_{J}^{I}$$
(33)

avec:

Le critère de stabilité du schéma de Lax-Wendroff s'obtient à partir d'une théorie linéarisée à coefficients gelés (critère de von Neumann), qui conduit à la condition nécessaire, mais non suffisante, de non explosion des composants de Fourier du champ U [31, 32]:  $\Delta X \leq \Delta Y/\max_j |\lambda_{D_j}|$ , où le dénominateur représente la plus grande valeur propre en module de *D*. Après quelques manipulations développées dans [29], ce critère s'exprime par une forme tout à fait semblable à celle obtenue pour un gaz parfait, à savoir:

$$\Delta X \leq \frac{r\Delta Y}{\frac{\mathrm{d}y_s}{\mathrm{d}x} + \frac{uv + a(V^2 - a^2)^{1/2}}{u^2 - a^2}}.$$
 (35)

Le pas  $\Delta X$  augmente au fur et à mesure que le calcul progresse dans l'écoulement supersonique et varie typiquement de 0,1 à 0,3 mm sur la zone de condensation étudiée.

Lorsque le champ U est connu sur une ligne de données initiale, on ne peut le calculer en dehors de la zone de dépendance numérique des points de cette ligne que si on le connaît entièrement sur les frontières. Pour ne pas détruire la précision du second ordre obtenue sur le champ U dans le domaine intérieur de l'écoulement par le schéma de Lax-Wendroff, il faut calculer ce champ sur la frontière par un algorithme du second ordre également. Comme on ne dispose que d'une seule condition aux limites physique dans le problème, à savoir l'annulation de la composante de la vitesse normale à la paroi, il faut donc ajouter une condition aux limites additionnelle de nature purement numérique et dont le choix est malaisé par suite d'instabilités imprévues par le critère de von Neumann qu'elles peuvent introduire [34-39]. Comme l'expérience montre que les conditions additionnelles basées sur des propriétés physiques de l'écoulement, comme celles qui utilisent les lignes caractéristiques du système d'équations, ne conduisent pas à des phénomènes d'instabilités [29, 34], nous avons sélectionné un schéma basé sur la méthode des caractéristiques pour calculer le champ sur la frontière dans notre problème.

Dans un écoulement supersonique, les équations de conservation le long des lignes caractéristiques sont les suivantes [18]:

(1) le long des lignes de Mach dans le gaz, d'équations différentielles:

$$dy = \frac{\beta\zeta \pm 1}{\beta \mp \zeta} dx$$
 ou  $\frac{dy}{dx} = \tan(\theta \pm \mu)$  (36)

avec:

$$\zeta = \tan \theta$$
 et  $\beta = 1/\tan \mu = (M^2 - 1)^{1/2}$  (37)

on a, avec  $\rho = \rho(P, T, q)$  et h = h(P, T, q) comme équations d'état,

$$\frac{1}{1+\zeta^2} d\zeta \pm \frac{\beta}{\rho V^2} dP \mp \frac{1}{\beta \zeta \pm 1} \left[ \frac{(\rho_T h_q - h_T \rho_q) dq}{\rho h_T} \right] \frac{dy}{dx} = 0.$$
(38)

De (4), on tire:

$$\rho_T = \frac{\partial \rho}{\partial T} \bigg|_{P,q} = -\frac{\rho}{T}$$

et:

$$\rho_q = \frac{\partial \rho}{\partial q} \bigg|_{P,S} = \rho \, \frac{R_v}{\overline{R}} \, .$$

De (7), on tire:

$$h_T = \frac{\partial h}{\partial T}\Big|_{P,q} = \overline{C_P} \text{ et } h_q = \frac{\partial h}{\partial q}\Big|_{P,T} = -L.$$

Par des manipulations élémentaires de (38), on obtient:

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}s^{\pm}} \pm \frac{\beta}{\rho V^2} \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}s^{\pm}} = \pm \frac{1}{\beta \mp \zeta} \left[ \frac{L}{\overline{C_p}T} - \frac{R_v}{\overline{R}} \right] \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}s^{\pm}} \quad (39)$$

où s est l'abscisse curviligne le long d'une ligne de Mach gauche (signe +) ou droite (signe -).

(2) le long des lignes de courant du fluide, on a:(a) la condition d'isentropicité de l'écoulement du fluide total:

$$dT + \frac{1}{h_T} \left( h_p - \frac{1}{\rho} \right) dP + \frac{h_q}{h_T} dq = 0$$

$$\overline{C_p} dT - \frac{1}{\rho} dP - L dq = 0$$
(40)

ou

(b) l'équation de Bernoulli:

$$\frac{V^2}{2} + h(P, T, q) = \text{const. ou } V \,\mathrm{d}V + \frac{1}{\rho} \,\mathrm{d}P = 0. \quad (41)$$

L'équation différentielle dq/ds fournissant le taux de variation de la fraction massique de condensat est remplacée, selon notre nouvelle formulation, par les 4 équations différentielles suivantes:

$$dZ_i = (S_i/\rho V) ds$$
 ou  $dZ_i = (S_i/\rho u) dx$ ,  $i = 0, 1, 2, 3.$  (42)

On engage un schéma de prédiction-correction sur les équations aux différences finies discrétisant (39)-(42). Ce schéma est du second ordre et s'est révélé stable.

#### DISCUSSION DES RESULTATS

La condensation de vapeur d'eau en mélange avec de l'air est examinée lors d'une détente dans deux types de tuyères bidimensionnelles planes:

l'une de forme hyperbolique et d'équation

$$y_w/h = \left[1 + \frac{1}{r} \left(\frac{x}{h}\right)^2\right]^{1/2}$$

avec  $r = \rho_t / h$  et l'autre droite et d'équation

$$y_w/h = [(r+1)/r]^{1/2} + (x/h-1)\tan\theta_w$$

1008



FIG. 2. Evolutions du taux de nucléation J (m<sup>-3</sup>·s<sup>-1</sup>), de la sursaturation S et du nombre de particules par unité de volume  $n_p$  (m<sup>-3</sup>) en fonction de la distance axiale x/h sur la paroi (courbes en trait plein) et sur l'axe (courbes en traits pointillés) d'une tuyère hyperbolique pour un mélange vapeur d'eau-air. Les valeurs des divers paramètres sont:  $X_{v_o} = 0,125$ ;  $P_0 = 20,5$  atm;  $T_0 = 534,4^\circ$ K;  $\xi = 1$ ;  $\sigma = \sigma_{\infty} =$  $75 \cdot 10^{-3}$  N/m;  $A_c = 2 \cdot 10^{-4}$  m<sup>2</sup>;  $h = 10^{-2}$  m.



FIG. 3. Evolutions du taux de nucléation J (m<sup>-3</sup>·s<sup>-1</sup>), de la sursaturation S et du nombre de particules par unité de volume  $n_p$  (m<sup>-3</sup>) en fonction de la distance axiale x/h sur la paroi (courbes en trait plein) et sur l'axe (courbes en traits pointillés) d'une tuyère droite pour un mélange vapeur d'eau-air. Les valeurs des divers paramètres sont données dans la légende de la Fig. 2 et  $\theta_w = 10$  deg.

La paroi située entre le col et la position x/h = 1 est hyperbolique dans les deux cas. Les conditions amont de l'écoulement supersonique ont été calculées par une méthode de perturbation du champ unidimensionnel isentropique d'un gaz parfait dans le cas de tuyères à grand rayon de courbure  $\rho_t$  au col (ici  $r = \rho_t/h = 5$ ) [40] entre le col et x/h = 0,2. Dans les exemples traités ici, le nombre de Mach isentropique devient partout supérieur à l'unité à partir du front situé en x/h = 0.2. Dans la partie où l'écoulement est isentropique, les fronts verticaux du domaine rectangulaire ont été divisés en pas égaux  $\Delta Y = 1/20$ . Le front à partir duquel le taux de nucléation J devient supérieur à l'unité et les fronts suivants ont été divisés en pas  $\Delta Y = 1/80$ . Les résultats de nos calculs, présentés sur les Figs. 2 à 8, sont relatifs à l'écoulement du fluide diphasique dans la partie supersonique de ces tuyères. Les caractéristiques de la zone de condensation le long des lignes de courant du fluide, et en particulier sur l'axe et sur la paroi des tuyères, y sont illustrées.

Lorsque tout phénomène de coalescence entre particules peut être négligé, la zone de condensation d'une vapeur sursaturée peut être divisée en deux zones spatialement distinctes: une région étroite où les germes apparaissent à un taux J élevé à la taille critique  $r^*$ , appelée zone de nucléation et une zone de croissance où les germes de taille critique grossissent par capture de molécules de la vapeur environnante à un taux qui dépend de la sursaturation locale  $S(=P_r/P_{sat})$ .

La phase condensée n'apparaît pas de manière significative avant qu'un certain degré de sursaturation de la vapeur, pour lequel la taille critique soit devenue suffisamment petite, ne soit atteint. Dans ces conditions, en effet, la valeur du taux de nucléation J augmente rapidement. Ceci entraîne la nucléation d'un grand nombre de germes. Après que le taux de nucléation ait atteint sa valeur maximale, l'état de sursaturation s'effondre rapidement par suite de l'augmentation de la pression de saturation et dans une faible mesure de la diminution de la pression partielle de la vapeur consommée dans le phénomène de condensation.

La condensation s'accompagne en effet d'un échauffement du gaz par relâchement de la chaleur latente et, par conséquent, d'une augmentation de la température. Comme la pression de saturation est une fonction très sensible de la température (loi de Clausius-Clapeyron), la sursaturation diminue très rapidement dès que la condensation est déclenchée. La zone de nucléation se termine lors de cet affaissement brutal de S et donc de J. Ces deux dernières grandeurs atteignent leur maximum à peu près au même endroit dans la tuyère (Figs. 2 et 3).

L'apparition de la phase condensée se manifeste par des déviations des évolutions des grandeurs physiques du champ gazeux par rapport à leurs évolutions isentropiques. Les ressauts de ces grandeurs, initiés dans la zone de nucléation, se développent ensuite dans la zone de croissance à un taux élevé dans un premier temps, puis de manière plus douce par après. La zone de croissance comporte elle-même deux souszones: la zone de croissance rapide, où les gradients des grandeurs du champ sont élevés, et la zone de croissance lente, où les deux phases évoluent vers un état d'équilibre statique, sans jamais l'atteindre par suite de la détente (Figs. 4–7).



FIG. 4. Evolutions de la pression  $P/P_0$ , de la température  $T/T_0$ , de la vitesse  $V/a_0$  et de la densité du gaz  $\rho_g/\rho_0$  en fonction de la distance axiale sur l'axe et sur la paroi d'une tuyère hyperbolique pour un mélange vapeur d'eau-air. Les divers paramètres sont donnés dans la légende de la Fig. 2.  $a_0$  est la vitesse du son au réservoir.



FIG. 5. Evolutions de la pression réduite  $P/P_0$ , de la température réduite  $T/T_0$ , de la vitesse réduite  $V/a_0$  et de la densité du gaz réduite en fonction de la distance axiale x/hdans une tuyère droite pour un mélange vapeur d'eau-air. Les divers paramètres sont donnés dans la légende de la Fig. 2.

Pour décrire mathématiquement l'apparition des germes de la phase condensée, on établit une expression du taux de nucléation J. L'état de nos connaissances actuelles, autant théoriques qu'expérimentales, ne nous permet pas de lever la controverse existant actuellement à propos de l'expression la plus adéquate de J. Il existe en effet deux types d'expressions de J: l'expression classique et l'expression semi-statistique



FIG. 6. Evolutions de la fraction massique de condensat  $q/X_{v_0}$  et de la taille moyenne *r* basée sur la surface  $(r^2)^{1/2}$  en fonction de la distance axiale x/h sur l'axe (courbes en traits pointillés) et sur la paroi (courbes en trait plein) d'une tuyère hyperbolique pour un mélange vapeur d'eau-air. Les divers paramètres sont donnés dans la légende de la Fig. 2.



FIG. 7. Evolutions de la fraction massique de cond<u>ensat</u>  $q/X_{v_0}$  et de la taille moyenne r basée sur la surface  $(r^2)^{1/2}$ en fonction de la distance axiale x/h sur l'axe (courbes en traits pointillés) et sur la paroi (courbes en trait plein) d'une tuyère droite pour un mélange vapeur d'eau-air. Les divers paramètres sont donnés dans la légende de la Fig. 2.

de Lothe et Pound [23, 24]. Cependant, pour certains fluides, comme la vapeur d'eau, on utilise le J classique car de nombreuses expériences ont montré qu'il n'y avait concordance avec les prévisions théoriques que dans ce cas [5, 9, 13, 14, 17, 22, 23, 41].

Une constatation prévisible et banale ressort d'une première analyse des résultats: les évolutions des grandeurs physiques dans la zone de nucléation et dans la zone de condensation tout entière, entre l'axe et la paroi de la tuyère, sont tout à fait semblables aux évolutions des grandeurs homologues dans un écoulement unidimensionnel. Sur l'axe et sur la paroi, ainsi que dans tout le domaine intérieur, les ressauts de la température et de la pression sont nettement plus marqués que ceux de la vitesse et de la densité (Figs. 4 et 5). Ceux-ci sont si faibles que la localisation des lignes de courant du fluide diffère très peu de la localisation des lignes de courant d'un gaz parfait en détente isentropique. Ceci est important pour la conception et le calcul approché d'un dispositif de séparation des phases par exemple.



FIG. 8. Lignes d'initiation de la condensation, définies comme les lieux des points où le taux de nucléation J atteint sa valeur maximale, dans des tuyères bidimensionnelles planes de forme hyperbolique et droite respectivement pour de la vapeur d'eau en mélange avec de l'air. Les valeurs des divers paramètres sont données dans la légende de la Fig. 2.

L'intérêt de l'étude bidimensionnelle de la condensation réside essentiellement dans la recherche de la répartition de la phase condensée dans l'écoulement en fonction de la forme de la tuyère. Ainsi, dans la tuyère hyperbolique, la condensation se déclenche d'abord sur la paroi et puis sur l'axe (Fig. 8).

La zone de nucléation est en outre plus étalée à la paroi que sur l'axe. Ces phénomènes s'expliquent par l'existence d'un plus grand taux de détente à la paroi. Dans la tuyère droite, la condensation se déclenche d'abord sur l'axe et puis sur la paroi (Fig. 8). Les profils des grandeurs physiques sur l'axe et sur la paroi, semblables à ceux du cas unidimensionnel, présentent la particularité de se recouper plusieurs fois. Cela s'explique qualitativement par les réflections des lignes de Mach sur l'axe et sur la paroi et par les divers domaines d'influence que ces lignes délimitent L'explication physique de la forme de la ligne condensation est la suivante: comme le montre la Fig. 8, la ligne d'initiation de la condensation, définie arbitrairement par le lieu des points où J atteint sa valeur maximale, se rapproche du col de la tuyère lorsque l'angle du divergent augmente. Ce phénomène est constaté dans l'étude de la nucléation en écoulement unidimensionnel chaque fois que le taux de la détente augmente [1, 2, 16]. Or une augmentation de l'angle du divergent correspond à une augmentation du taux de la détente. D'autre part, la forme de la ligne de condensation dépend étroitement de l'évolution des grandeurs physiques avant la condensation. Physiquement, l'effet bidimensionnel de la paroi de la tuyère, qui se marque sur la forme de la ligne sonique et des lignes iso-Mach par exemple, se répercute également sur la forme du front de condensation et sur l'évolution de toutes les grandeurs physiques de l'écoulement caractérisant le gaz et le nuage particulaire.

Remerciements-Les auteurs remercient Monsieur J. A. Essers pour sa collaboration dans le domaine de l'Analyse Numérique.

#### BIBLIOGRAPHIE

- Ph. Mathieu, Condensation of ammonia by homogeneous nucleation in supersonic nozzles, Int. J. Multiphase Flow 3(2), 181-195 (1976).
- Ph. Mathieu, Condensation de vapeurs dans des écoulements supersoniques en tuyères, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences Appliquées, Université de Liège (1975).
- Ph. Mathieu, Condensation de vapeurs dans des écoulements supersoniques en tuyères, Colln Publ. Fac. Sci. Appl. Univ. Liège 58, 1-56 (1976).
- S. L. Soo, Flows of suspensions, dans *Fluid Dynamics* of *Particulate Systems*, Von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 51 (1973).
- P. P. Wegener, Gasdynamics of expansion flows with condensation, dans *Nonequilibrium Flows, Gasdynamics Series*, édité par P. P. Wegener, Vol. 1, part 1, Chapter IV. M. Dekker, New York (1969).
- P. P. Wegener, J. A. Clumpner et B. J. C. Wu, Homogeneous nucleation and growth of ethanol drops in supersonic flow, *Physics Fluids* 15(11), 1869 (1972).
- P. P. Wegener et L. M. Mack, Condensation in supersonic and hypersonic wind tunnels, *Adv. Appl. Mech.* 5, 307 (1958).
- P. P. Wegener et J. Y. Parlange, Non-equilibrium nozzle flow with condensation, dans *Recent Advances in Aerothermo-chemistry*, edité par J. Glassman, Vol. 2, p. 607. AGARD CP No. 12, Rue de Varenne, Paris (1967).
- 9. P. P. Wegener et A. A. Pouring, Experiments on condensation of water vapor by homogeneous nucleation in nozzles, *Physics Fluids* 7, 352 (1964).
- J. M. Delhaye, Equations fondamentales des écoulements diphasiques, Rapport CEA-R 3429 (1968).
- A. Fortier, Mécanique des suspensions, Monographies de Mécanique des Fluides et Thermique. Masson, Paris (1967).
- J. L. Griffin et P. M. Sherman, Computer analysis of condensation in highly expanded flows, AIAA Jl 3(10), 1813 (1965).
- G. Gyarmathy, Two-phase flows in turbines, Von Karman Inst. for Fluid Dynamics, Lecture Series 70 (1974).
- P. G. Hill, Condensation of water vapor during supersonic expansion in nozzles, J. Fluid Mech. 25, 593 (1966).
- P. G. Hill, H. Witting et E. D. Demetri, Condensation of metal vapors during rapid expansion, J. Heat Transfer 85, 303 (1963).
- 16. Ph. Mathieu, Condensation d'une vapeur en mélange

avec un gaz inerte dans une détente supersonique, Colln Publ. Fac. Sci. Appl., Univ. Liège 43, 89-122 (1973).

- 17. K. Oswatitsch, Kondensationserscheinungen in Überschalldüsen, Z. Angew. Math. Mech. 22, 1 (1942).
- O. M. Belotserkovshii et P. I. Chushkin, The numerical solution of problems in gas dynamics, dans Basic Developments in Fluid Dynamics, édité par M. Holt, Vol. 1. Academic Press, New York (1965).
- J. A. Bouré, A. A. Fritte, M. M. Giot et M. L. Réocreux, Highlights of two-phase critical flow: on the links between maximum flow rates, sonic velocities, propagation and transfer phenomena in single and two phase flows, *Int. J. Multiphase Flow* 3(1), 1-22 (1976).
- T. Chmielewski et P. M. Sherman, Effect of a carrier gas on homogeneous condensation in a supersonic nozzle, AIAA Jl 8(4), 789 (1970).
- 21. G. M. Hidy et J. R. Brock, The Dynamics of Aerocolloidal Systems. Pergamon Press, Oxford (1970).
- G. A. Saltanov, L. I. Seleznev et G. V. Tsiklauri, Generation and growth of condensed phase in highvelocity flows. *Int. J. Heat Mass Transfer* 16, 1577 (1973).
- J. Feder, K. C. Russell, J. Lothe et G. M. Pound, Homogeneous nucleation and growth of droplets in vapours, *Adv. Phys.* 15, 111 (1966).
- J. Lothe et G. M. Pound, Statistical mechanics of nucleation, dans *Nucleation*, édité par A. C. Zettlemoyer. M. Dekker, New York (1969).
- J. Hirth et G. M. Pound, Condensation and evaporation, nucleation and growth kinetics, *Progress in Materials Science*, édité par B. Chalmers, Vol. 11. Pergamon Press, Oxford (1963).
- F. E. Marble, Some gas-dynamic problems in the flow of condensing vapors, Astronautica Acta 14, (1968-69).
- F. E. Marble, Dynamics of dusty gases, Ann. Rev. Fluid Mech. 2, 397 (1970).
- S. A. Schaaf et P. L. Chambre, Flow of rarefied gases, dans *Fundamentals of Gas Dynamics*, édité par H. W. Emmons, Section 4, p. 687. Princeton Univ. Press, Princeton (1958).
- 29. Ph. Mathieu, Ecoulement supersonique bidimensionnel

stationnaire d'un fluide dans des tuyères planes, Colln Publ. Fac. Sci. Appl. Univ. Liège 45, 61-107 (1974).

- P. M. Laval, Méthode instationnaire de calcul de l'écoulement transsonique dans une tuyère, O.N.E.R.A. (1970).
- R. D. Richtmeyer et K. W. Morton, Difference Methods for Initial Value Problems, 2nd edn. John Wiley, New York (1967).
- P. D. Lax et B. Wendroff, Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy, Comm. Pure Appl. Math. 17, 381 (1964).
- A. Ralston et H. S. Wilf, Méthodes Mathématiques pour Calculateurs Arithmétiques. Dunod (1965).
- M. J. Abbett, Boundary condition computational procedures for inviscid, supersonic steady flow field calculations, Aerotherm. Report 71-41 (1971).
- 35. J. A. Essers, Approches numériques nouvelles pour le calcul d'écoulements stationnaires compressibles d'un fluide parfait, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences Appliquées, Université de Liège (1977).
- 36. H. O. Kreiss, Boundary conditions for difference approximation of hyperbolic differential equations, dans Advances in Numerical Fluid Dynamics, AGARD Lecture Series No. 64. AGARD, Neuilly-sur-Seine, France (1970).
- 37. G. Moretti, The importance of boundary conditions in the numerical treatment of hyperbolic equations, *Physics Fluids, Supplement II, Proceedings on the Int. Symposium on High Speed Computing in Fluid Dynamics*, Vol. 12 (1969).
- J. J. Smolderen, Computational Fluid Dynamics, von Karman Institute for Fluid Dynamics, Lecture Series 74 (1975).
- 39. J. J. Smolderen, Problèmes de stabilité numérique posés par les systèmes hyperboliques avec conditions aux limites, Colloques IRIA, Méthodes de calcul scientifique et technique, Paris, 17-21 décembre (1973).
- 40. J. R. Kliegel et V. Quan, Convergent-divergent nozzle flows, AIAA J16(9), 1728 (1968).
- H. L. Jaeger, E. J. Wilson, P. G. Hill et K. C. Russell, Nucleation of supersaturated vapors in nozzles—I. H<sub>2</sub>O and NH<sub>3</sub>, J. Chem. Phys. 51(12), 5380 (1969).

#### CALCULATION OF SUPERSONIC TWO-DIMENSIONAL FLOW IN A TWO-PHASE FLUID IN THE PRESENCE OF CONDENSATION

Abstract—Thanks to the replacement of the condensation kinetics equation of a vapor in a gas stationary flow in a two-dimensional configuration by four differential equations describing the particle size distribution in the condensed phase, the system of hyperbolic differential equations for the evolutions of the two phases may be solved numerically by a Lax–Wendroff finite difference scheme. The theoretical results show how the evolutions of the physical flow quantities along the two-phase fluid streamlines, the properties of the nucleation and growth zones of the condensed nuclei, and the shape of the line of onset of condensation, are influenced by the two-dimensional effect due to the nozzle geometry.

#### DIE BERECHNUNG ZWEIDIMENSIONALER ZWEIPHASIGER ÜBERSCHALLSTRÖMUNGEN MIT KONDENSATION

Zusammenfassung – Bei dem vorgeschlagenen Rechenverfahren wird eine die Kondensationskinetik eines Dampfes in stationärer, zweidimensionaler Gasströmung beschreibende Gleichung durch vier Differentialgleichungen ersetzt, welche die Verteilung der Partikelgröße der kondensierten Phase wiedergeben. Das System der hyperbolischen Differentialgleichungen, welches die Entwicklung beider Phasen beschreibt, kann mit Hilfe des Lax-Wendroff-Differenzenschemas numerisch gelöst werden. Die theoretischen Resultate zeigen, in welcher Form die physikalischen Strömungsparameter längs der Zweiphasenströmung, die Bildungs- und Wachstumszone der Kondensatkeime und der Verlauf der Kondensationslinie von der durch die Düsengeometrie hervorgerufenen zweidimensionalen Strömung beeinflußt werden.

# РАСЧЕТ СВЕРХЗВУКОВОГО ДВУМЕРНОГО ПОТОКА ДВУХФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ КОНДЕНСАЦИИ

Аннотация — Замена уравнения кинетики конденсации пара в стационарном потоке газа в двумерной конфигурации четырьмя дифференциальными уравнениями, описывающими распределение размеров частиц в конденсированной фазе, позволяет получить с помощью конечноразностной схемы Лакса-Вендроффа численное решение системы гиперболических дифференциальных уравнений для двух фаз. Теоретические расчеты показывают, какое влияние оказывает двумерная конфигурация сопла на изменение физических свойств потока вдоль линий тока двухфазной жидкости на характеристики зародышеобразования и зон роста конденсированных ядер, а также форму линии начала конденсации.