

Écoulement hors d'équilibre chimique et vibrationnel dans une tuyère hypersonique axisymétrique

Rabah Haoui^{a*}, Abderrahmane Gahmousse^a, David Zeitoun^b

^a Institut de Génie Mécanique, USTHB, BP 32 Al Alia, Bab Ezzouar, 16111 Alger, Algérie

^b Département des Milieux Hors Équilibre, IUSTI, Technopôle de Château, Gombert 5, rue Enrico Fermi, F-13453 Marseille cedex 13, France

(Reçu le 16 novembre 1999, accepté le 19 octobre 2000)

Abstract — Chemical and vibrational nonequilibrium flow in a hypersonic axisymmetric nozzle. The aim of this work is to analyse the high temperature flow in a hypersonic nozzle taking into account the chemical and vibrational nonequilibrium for the different species of air mixture. The transition from 3D to 2D axisymmetric is assured by the technique of the domain perturbation. The numerical results show the difference between two different models: the model of 3 chemical reactions (Zeldovich model) and the model of 17 chemical reactions. © 2001 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

reactive flow / chemical kinetic / dissociation / vibration / nonequilibrium / frozen / supersonic flow / hypersonic flow

Résumé — Cette étude porte sur les écoulements de gaz à haute température en tuyère hypersonique et tient compte des processus de non équilibre chimique et vibrationnel des espèces constituant le mélange d'air dissocié. L'écoulement est en général tridimensionnel, le passage des équations 3D à 2D axisymétrique est assuré par une technique de perturbation de domaine. L'intégration est basée sur une méthode de volumes finis. Deux modèles cinétiques : le modèle de Zeldovich à trois réactions chimiques et le modèle à 17 réactions, sont testés et les résultats numériques obtenus mettent en évidence l'importance du modèle cinétique choisi. © 2001 Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

écoulement réactif / cinétique chimique / dissociation / vibration / hors équilibre / figeage / écoulement supersonique / écoulement hypersonique

Nomenclature

| | | |
|----------|---|--|
| a | vitesse du son | $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ |
| c_{vS} | capacité thermique massique à volume constant de l'espèce s | $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ |
| e | énergie interne massique | $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ |
| e_{vS} | énergie de vibration massique pour l'espèce s | $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ |
| h_f^0 | enthalpie massique de formation de l'espèce s | $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$ |
| K_f | constante de cinétique chimique directe (forward) | $\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ |
| K_b | constante de cinétique chimique inverse (backward) | $\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ |
| K_{eq} | constante d'équilibre | |
| M_s | masse molaire de l'espèce s | $\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ |

| | | |
|-----------|---|--|
| M | masse molaire du mélange | $\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ |
| p | pression du mélange | $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-2}$ |
| $r = R/M$ | constante d'un gaz particulier | $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ |
| R | constante universelle des gaz parfaits | $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ |
| t | temps | s |
| V | vecteur vitesse | $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ |
| u, v, w | vitesses suivant les directions i, j et k | $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ |
| X_s | fraction molaire de l'espèce s | |
| Y_s | fraction massique de l'espèce s | |

Symboles grecs

| | | |
|---------------------|--|---|
| ν | coefficient stœchiométrique | |
| ρ | masse volumique du mélange | $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ |
| $\rho_s = \rho Y_s$ | masse volumique de l'espèce s | $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ |
| γ | rapport des capacités thermiques | |
| θ_v | température caractéristique de vibration | K |
| τ | temps caractéristique de vibration | s |
| ω_{cS} | terme de production chimique de l'espèce s | $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$ |

* Correspondance et tirés à part.
 E-mail address: rabah@iusti.univ-mrs.fr (R. Haoui).

ω_{vs} terme de production vibrationnelle de l'espèce s $J \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$

1. INTRODUCTION

Cet article présente le calcul de l'écoulement dans la tuyère d'une soufflerie à choc destinée essentiellement à l'étude d'écoulements hypersoniques autour de véhicules spatiaux. Toutefois, les expériences réalisées en soufflerie hypersonique restent une source précieuse de renseignements sur les phénomènes physico-chimiques qui se produisent dans l'écoulement d'air dans la tuyère et entourant la maquette. Les simulations numériques sont venues compléter les études théoriques et expérimentales grâce à l'apparition de calculateurs puissants et au développement d'outils mathématiques performants. Dans ce travail on a élaboré un code de calcul pour simuler un écoulement hypersonique dans une tuyère axisymétrique. Le gaz considéré est de l'air dissocié, composé de cinq espèces chimiques qui sont O_2 , N_2 , NO , O et N . A l'état standard, l'air est composé de 21% de O_2 et 79% de N_2 . Dans le cas présent, les conditions réservoir de la tuyère sont obtenues après réflexion d'une onde de choc en fond du tube à choc. Cette réflexion permet de créer une masse de gaz à haute enthalpie (hautes pression et température) et à l'équilibre thermochimique. L'écoulement stationnaire dans la tuyère convergente divergente est obtenu par détente de ce gaz. En sortie de tuyère, l'écoulement super ou hypersonique peut être ainsi utilisé comme conditions amont d'un écoulement autour d'une maquette [1].

Dans le divergent de la tuyère l'écoulement supersonique est fortement détendu et la température du mélange gazeux diminue très rapidement. Des recombinaisons chimiques auront donc lieu dans l'écoulement. Il y a plusieurs modèles qui traitent la cinétique chimique et qui diffèrent selon le nombre de réactions chimiques prises en considération. Pour montrer l'influence du modèle choisi sur l'écoulement, nous avons testé le modèle à trois réactions chimiques, appelé « modèle de Zeldovich », et le modèle à 17 réactions chimiques qui tient compte de toutes les réactions possibles entre les espèces chimiques constituant le mélange. De plus, ce mélange étant constitué de molécules diatomiques, le déséquilibre vibrationnel de ces molécules sera pris en compte.

Les vitesses des réactions utilisées sont celles qui suivent la loi d'Arrhénius. Rappelons que le couplage entre la chimie et la vibration des molécules n'est pas pris en considération ici, son influence dans un écoulement en tuyère peut être négligée [2]. Pour le déséquilibre vibrationnel on utilise l'expression de Landau Teller [3]. Le

temps de relaxation vibrationnelle est donné par le modèle de Blackmann [4]. Les temps de relaxation pour la translation et la rotation des molécules étant très courts devant le temps caractéristique de l'écoulement, le retour à l'équilibre pour ces modes est très rapide ; ainsi, on supposera que l'équilibre translationnel et rotationnel est réalisé en tout point de l'écoulement et à tout instant. Compte tenu des plages de températures dans lesquelles se place notre étude (< 8000 K), les phénomènes d'ionisation des espèces peuvent être négligés. D'autre part, les effets de rayonnement ne seront pas pris en considération. La cinétique chimique et le déséquilibre vibrationnel sont pris en compte dans tout le domaine de calcul que représente la tuyère convergente-divergente. Le système d'équations aux dérivées partielles non linéaires, équations d'Euler, qui régit cet écoulement est résolu d'une façon instationnaire, par un schéma explicite.

2. EQUATIONS D'EULER

Les équations d'Euler pour le mélange en déséquilibre thermodynamique, contiennent, en plus des équations de conservation de masse, quantité de mouvement et d'énergie, les équations d'évolution des espèces chimiques (N_2 , O_2 , NO , O , N) et celles de l'énergie de vibration des molécules. Il est à noter que seules les espèces O_2 et N_2 sont considérées hors d'équilibre vibrationnel. Le monoxyde d'azote NO , est pris en équilibre vibrationnel puisque son temps caractéristique de vibration est de deux ordres de grandeur plus faible que celui de O_2 entre 3000 et 7000 K [5].

Sous sa forme vectorielle, le système d'équations s'écrit :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \text{div}(\Phi(W)) = \Omega \tag{1}$$

avec :

$$W = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho e \\ \rho_s \\ (\rho_s e_{vs})_{O_2, N_2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Omega = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_{cs} \\ (\omega_{vs})_{O_2, N_2} \end{pmatrix} \tag{2}$$

$$\Phi = F \cdot i + G \cdot j + H \cdot k \tag{3}$$

où : F , G et H sont :

$$F = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (\rho e + p)u \\ \rho_s u \\ (\rho_s e_{vs} u)_{O_2, N_2} \end{Bmatrix}, \quad G = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (\rho e + p)v \\ \rho_s v \\ (\rho_s e_{vs} v)_{O_2, N_2} \end{Bmatrix} \quad (4)$$

$$H = \begin{Bmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (\rho e + p)w \\ \rho_s w \\ (\rho_s e_{vs} w)_{O_2, N_2} \end{Bmatrix}$$

e est l'énergie par unité de masse telle que :

$$e = \sum_{s=1}^5 c_{vs} \cdot T + \sum_{s=1}^3 Y_s \cdot e_{vs} + \sum_{s=1}^5 Y_s \cdot h_f^0 + \frac{1}{2} V^2 \quad (5)$$

h_f^0 est l'enthalpie de formation de l'espèce s , soit, en $J \cdot kg^{-1}$:

$$\begin{aligned} h_f^0(O) &= 15,43 \cdot 10^6, & h_f^0(N) &= 33,62 \cdot 10^6 \\ h_f^0(NO) &= 2,996 \cdot 10^6, & h_f^0(O_2) &= h_f^0(N_2) = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

La pression du mélange est obtenue par l'équation d'état :

$$p = \sum_{s=1}^5 p_s = \rho RT \sum_{s=1}^5 \frac{Y_s}{M_s} = \rho \frac{R}{M} T = \rho r T \quad (7)$$

où $r = \frac{R}{M}$.

La température du mélange est calculée à partir de l'équation d'énergie (5).

ω_{cs} est le terme source de l'équation d'évolution chimique de l'espèce s , il est donné par :

$$\omega_{cs} = M_s \sum_{r=1}^r (v_s'' - v_s') J_r \quad (8)$$

où :

$$J_r = K_f \prod_s \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{v_s'} - K_b \prod_s \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{v_s''} \quad (9)$$

v_s'' et v_s' sont les coefficients stœchiométriques d'une réaction chimique (r), telle que :

$$\sum_s v_s' A_s \xrightleftharpoons[K_{b,r}]{K_{f,r}} \sum_s v_s'' A_s \quad (r = \text{réaction}) \quad (10)$$

K_f et K_b représentent respectivement les constantes de vitesse directe et inverse de chaque réaction (r) :

$$K_f = AT^n \exp\left(-\frac{T_d}{T}\right) \quad (11)$$

avec :

$$K_b = K_f / K_{eq} \quad (12)$$

pour les constantes A , n et la température caractéristique de dissociation T_d , on a choisi le modèle de Gardiner [6] (*tableau I*).

K_{eq} est la constante d'équilibre de la réaction chimique elle est donnée comme un polynôme du 4^{ème} degré, soit :

$$K_{eq} = \exp(c_0 + c_1 z + c_2 z^2 + c_3 z^3 + c_4 z^4) \quad (13)$$

avec :

$$z = \frac{10000}{T} \quad (14)$$

les constantes c_0 à c_4 sont connues pour chaque réaction chimique [6] (*tableau II*).

TABLEAU I / TABLE I
Constantes directes. Modèle de Gardiner.
Forward constants. Gardiner models.

| Réactions | A | n | T_d |
|-----------|----------|------|--------|
| $r = 1$ | 1,64e+19 | -1 | 59380 |
| $r = 2$ | 3,64e+18 | -1 | 59380 |
| $r = 3$ | 1,82e+18 | -1 | 59380 |
| $r = 4$ | 4,56e+19 | -1 | 59380 |
| $r = 5$ | 1,82e+18 | -1 | 59380 |
| $r = 6$ | 1,40e+21 | -1,6 | 113200 |
| $r = 7$ | 3,70e+21 | -1,6 | 113200 |
| $r = 8$ | 1,40e+21 | -1,6 | 113200 |
| $r = 9$ | 1,40e+21 | -1,6 | 113200 |
| $r = 10$ | 1,60e+22 | -1,6 | 113200 |
| $r = 11$ | 4,00e+20 | -1,5 | 75510 |
| $r = 12$ | 4,00e+20 | -1,5 | 75510 |
| $r = 13$ | 8,00e+20 | -1,5 | 75510 |
| $r = 14$ | 8,00e+20 | -1,5 | 75510 |
| $r = 15$ | 8,00e+20 | -1,5 | 75510 |
| $r = 16$ | 1,82e+14 | 0 | 38370 |
| $r = 17$ | 3,80e+9 | 1 | 20820 |

TABLEAU II / TABLE II
Constantes d'équilibre.
Equilibrium constants.

| Réactions | c_0 | c_1 | c_2 | c_3 | c_4 |
|------------------------|-------|---------|--------|--------|--------|
| $r = 1 \text{ à } 5$ | 1,335 | -4,127 | -0,616 | 0,093 | -0,005 |
| $r = 6 \text{ à } 10$ | 3,898 | -12,611 | 0,683 | -0,118 | 0,006 |
| $r = 11 \text{ à } 15$ | 1,549 | -7,784 | 0,228 | -0,043 | 0,002 |
| $r = 16$ | 2,349 | -4,828 | 0,455 | -0,075 | 0,004 |
| $r = 17$ | 0,215 | -3,658 | 0,843 | -0,136 | 0,007 |

ω_{vs} étant le terme de production d'énergie de vibration tel que :

$$\omega_{vs} = \rho_s \frac{e_v(T) - e_v(T_v)}{\tau_s} + e_{vs} \cdot \omega_{cs} \quad (15)$$

$e_v(T)$ étant l'énergie de vibration à l'équilibre, c'est-à-dire à la température de translation-rotation, elle est donnée par :

$$e_v(T) = \frac{r \cdot \theta_v}{\exp(\theta_v/T) - 1} \quad (16)$$

r est la constante d'un gaz particulier et θ_v est la température caractéristique de vibration. Elle est donnée pour chaque molécule. Dans notre cas :

$$\begin{aligned} \theta_{vO_2} &= 2239 \text{ K}, & \theta_{vN_2} &= 3354 \text{ K} \\ \theta_{vNO} &= 2720 \text{ K} \end{aligned} \quad (17)$$

$e_v(T_v)$ est l'énergie de vibration à la température de vibration T_v . τ_s est le temps caractéristique de vibration d'une espèce s dans le mélange, il est fonction de la température, de la pression et des fractions molaires X_i . Il peut être calculé comme suit [7] :

$$\frac{1}{\tau_s} = \sum_{i=1}^5 \frac{X_i}{\tau_{s,i}} \quad (18)$$

où : $s = O_2, N_2$ et $i = O_2, N_2, NO, O, N$. $\tau_{s,i}$ est le temps caractéristique de vibration de l'espèce s dans un mélange contenant l'espèce i . On a comme données :

$$\tau_{O_2, O_2} = \frac{1,692 \cdot 10^{-9}}{p} \exp(101,44T^{-1/3}) \quad (19)$$

$$\tau_{N_2, N_2} = \frac{1,1 \cdot 10^{-11}}{p} T^{1/2} \exp(154,0T^{-1/3}) \quad (20)$$

Des expériences pour des échanges binaires, ont permis d'évaluer des temps de relaxation vibrationnelle de O_2 dans l'oxygène monoatomique—travaux de Kiefer et

Lutz [8] et de N_2 dans O travaux de Breshears et Bird [9], tous deux corrélés par Thivet [10]. La pression p est en atmosphères et τ en secondes.

$$\tau_{O_2, O} = \frac{T^{2/3}}{p} \exp(55,2T^{-1/3} - 26,95) \quad (21)$$

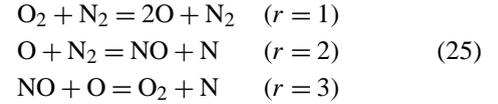
$$\tau_{N_2, O} = \frac{T^{2/3}}{p} \exp(70,3T^{-1/3} - 24,35) \quad (22)$$

Pour déterminer les temps de relaxation qui ne sont pas donnés par les corrélations expérimentales, on suppose que le temps de relaxation d'une espèce s est le même quelle que soit l'espèce i qu'elle rencontre, pourvu que leurs masses soient proches. On peut utiliser ainsi les approximations suivantes :

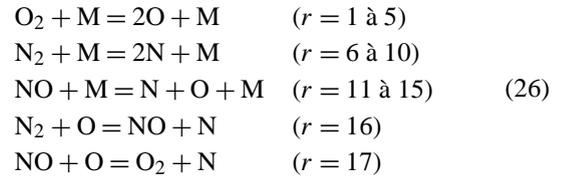
$$\tau_{O_2, N} \cong \tau_{O_2, O}, \quad \tau_{N_2, N} \cong \tau_{N_2, O} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \tau_{O_2, N_2} &\cong \tau_{O_2, NO} \cong \tau_{O_2, O_2} \\ \tau_{N_2, O_2} &\cong \tau_{N_2, NO} \cong \tau_{N_2, N_2} \end{aligned} \quad (24)$$

Nous allons tester deux modèles cinétiques différents ; le modèle de Zeldovich à trois réactions chimiques :



et le modèle à 17 réactions :



M peut être une des cinq espèces chimiques : O_2, N_2, NO, O ou N (dans l'ordre).

3. FORMULATION DE TYPE VOLUMES FINIS PAR PERTURBATION DE DOMAINE

Le problème étant axi-symétrique, on ne perd pas de généralité en recherchant la solution aux points d'un domaine infiniment petit (*figure 1*). Une méthode développée au sein du projet Sinus de l'INRIA Sophia-Antipolis [11] permet de passer d'un domaine 3D à un domaine 2D axisymétrique en utilisant une technique de perturbation de domaine. Le système d'équations peut s'écrire :

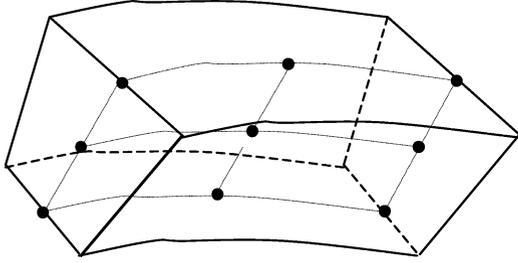


Figure 1. Schéma d'une maille en volume fini.
Figure 1. Diagram of mesh in finite volume.

$$\begin{aligned} \text{mes}(i, j) \frac{\partial W}{\partial t} + \sum_{\text{surface}} (F \cdot i + G \cdot j) \cdot \eta - H \cdot \text{aire}(i, j) \\ = \text{mes}(i, j) \cdot \Omega \end{aligned} \quad (27)$$

où $\text{mes}(i, j)$ est la mesure d'un volume infiniment petit de centre (i, j) en m^3 , $\text{aire}(i, j)$ est la surface du plan de symétrie passant par le centre du volume élémentaire, η est la normale intégrée. Pour un calcul détaillé de η , $\text{aire}(i, j)$ et $\text{mes}(i, j)$, on se reportera aux travaux de Goudjo [11].

Le troisième terme de l'équation traduit l'axisymétrie de l'écoulement. Les flux, W , F , G et H sont donnés par :

$$\begin{aligned} W = \begin{Bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho_s \\ (\rho_{vs} e_{vs})_{\text{O}_2, \text{N}_2} \end{Bmatrix}, \quad \Omega = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_{cs} \\ (\omega_{vs})_{\text{O}_2, \text{N}_2} \end{Bmatrix} \\ F = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (\rho e + p)u \\ \rho_s u \\ (\rho_s e_{vs} u)_{\text{O}_2, \text{N}_2} \end{Bmatrix} \\ G = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (\rho e + p)v \\ \rho_s v \\ (\rho_s e_{vs} v)_{\text{O}_2, \text{N}_2} \end{Bmatrix}, \quad H = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (28)$$

4. DISCRÉTISATION EN TEMPS

La méthode numérique choisie étant basée sur une approche explicite en temps et en espace. Le pas de temps Δt choisi est tel que :

$$\Delta t = \min \frac{\Delta x \cdot CFL}{(u + a)} \quad (29)$$

Le CFL (Courant, Friedrich, Lewis) est un coefficient de stabilité ; u est la vitesse de l'écoulement et a la vitesse du son. Δx est la petite longueur de la maille au même point (i, j) .

A chaque pas de temps et pour chaque point (i, j) , le système d'équation (27) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} (W_{i,j}^{n+1} - W_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{\text{mes}(i, j)} \sum_{\text{surface}} (F \cdot i + G \cdot j)_{i,j}^n \cdot \eta \\ = \Delta t \frac{\text{aire}(i, j)}{\text{mes}(i, j)} H_{i,j}^n + \Delta t \cdot \Omega_{i,j}^n \end{aligned} \quad (30)$$

d'où :

$$\begin{aligned} W_{i,j}^{n+1} = W_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\text{mes}(i, j)} \sum_{\text{surface}} (F \cdot i + G \cdot j)_{i,j}^n \cdot \eta \\ + \Delta t \frac{\text{aire}(i, j)}{\text{mes}(i, j)} H_{i,j}^n + \Delta t \cdot \Omega_{i,j}^n \end{aligned} \quad (31)$$

Le choix du maillage joue un rôle déterminant dans la convergence des calculs. Ainsi, il convient en effet d'avoir des mailles suffisamment petites aux endroits où les gradients des paramètres de l'écoulement sont importants (col de la tuyère).

5. CONDITIONS AUX LIMITES

5.1. Frontière amont

On fixe les grandeurs thermodynamiques p , T et Y_s sur la ligne d'entrée mais la faible vitesse de l'écoulement, $\text{Mach} = 0,019$, impose de laisser flottante une des grandeurs d'état de l'écoulement. On choisit ici d'extrapoler le module de la vitesse V et d'orienter les composantes u et v suivant les lignes de maillage. Cette correction permet un ajustement du débit à l'entrée de la tuyère.

5.2. Parois de la tuyère

Dans ce cas, on a une condition de glissement puisque l'écoulement est non visqueux :

$$\vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en tout point } M(x, y) \quad (32)$$

\vec{n} étant la normale à la frontière de la cellule située sur le bord du domaine.

5.3. Axe de symétrie

En tout point M de l'axe de symétrie on a :

$$v = 0 \implies \vec{V} = u\vec{i} \quad (33)$$

5.4. Sortie de la tuyère

A la sortie du divergent de la tuyère, le nombre de Mach étant > 1 , les valeurs des paramètres de l'écoulement sont extrapolées à partir des valeurs à l'intérieur du domaine de calcul.

6. RÉSULTATS ET INTERPRÉTATIONS (MODÈLE DE ZELDOVICH)

La tuyère utilisée dans notre étude commence par un convergent conique de 45° , puis se prolonge par un arc de cercle dont le rayon est égal à celui du col et se termine par un divergent conique de 10° . Le maillage se compose de 150 nœuds suivant l'axe et 10 nœuds suivant le rayon (figure 2). La composition du mélange à l'entrée de la tuyère est :

$$\begin{aligned} Y_{O_2} &= 1,51\%, & Y_{N_2} &= 73,64\% \\ Y_{NO} &= 7,70\%, & Y_O &= 15,92\% \\ Y_N &= 1,23\% \end{aligned} \quad (34)$$

Ces valeurs ont été calculées à l'équilibre thermo-chimique sous une pression de 100 bar et une température de 6000 K.

La convergence a eu lieu après 4000 itérations pour un écoulement sans thermo-chimie, les fractions massiques

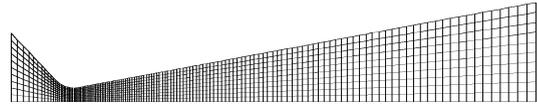


Figure 2. Maillage de la tuyère (150 × 10).
Figure 2. Grid of the nozzle (150 × 10).

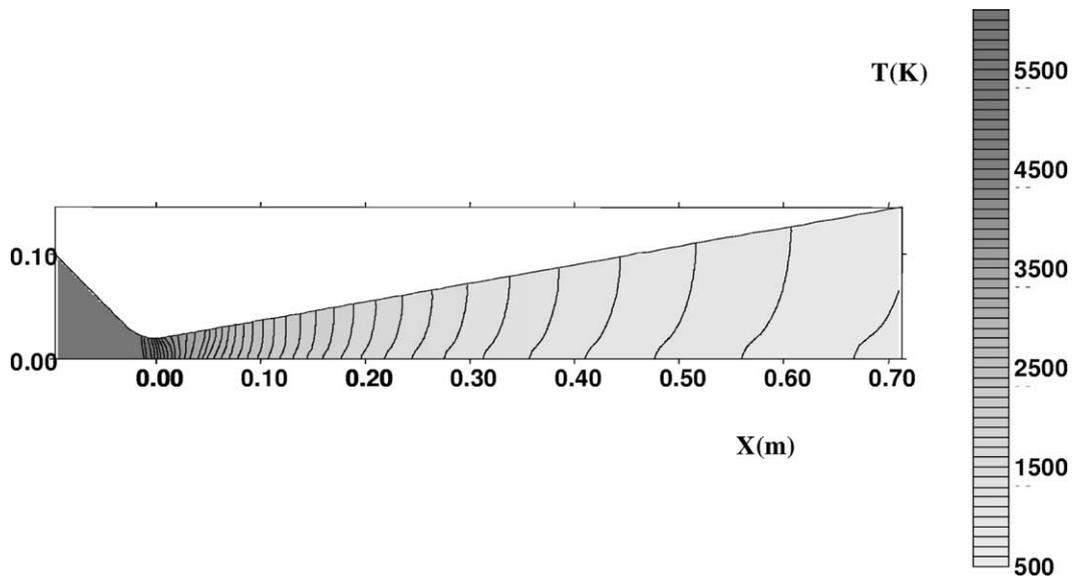


Figure 3. Iso-températures dans une tuyère axi-symétrique.
Figure 3. Iso-temperatures in the axisymmetric nozzle.

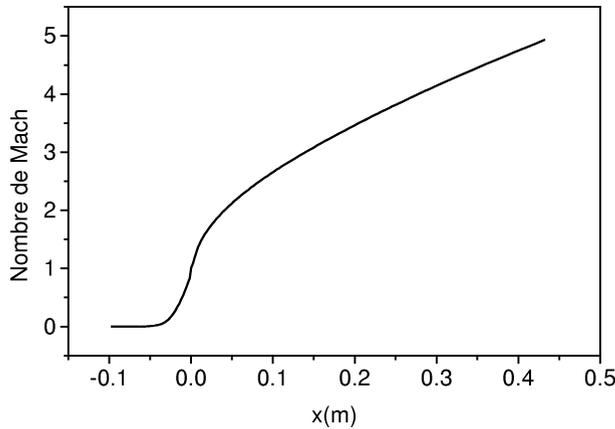


Figure 4. Évolution du nombre de Mach le long de l'axe de la tuyère.

Figure 4. Evolution of the Mach number along of nozzle axis.

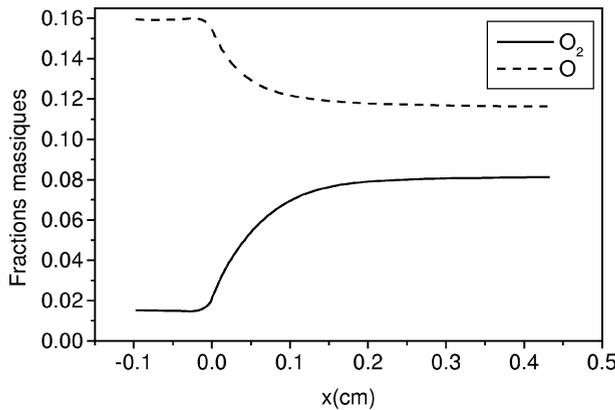


Figure 5. Évolution des fractions massiques le long de l'axe de la tuyère.

Figure 5. Evolution of the mass fractions along of nozzle axis.

des espèces chimiques et l'énergie de vibration sont supposées figées, le CFL est pris égal à 0,04. Le résidu sur la variation relative de la masse volumique et de l'ordre de 10^{-8} . Dans le cas d'un écoulement réactif, le temps de calcul prend plusieurs heures et le nombre d'itérations est 100 fois plus que le cas sans chimie, le résidu est toujours de l'ordre 10^{-8} . La figure 3 montre les isothermes pour l'écoulement sans thermochimie. A la sortie de la tuyère, le nombre de Mach et la température sont respectivement 6 et 500 K. Sur la figure 4, nous donnons la variation du nombre de Mach sur l'axe de la tuyère pour l'écoulement hors d'équilibre thermochimique (réactif), il est de 4,93 à la sortie de la tuyère. Concernant les fractions massiques de l'oxygène monoatomique O et diatomique O₂ (figure 5), on remarque qu'il y a un figeage dans la partie divergente de la tuyère. Les réac-

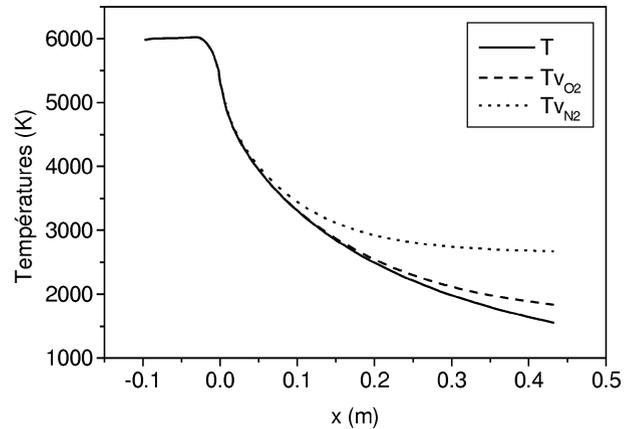


Figure 6. Évolution de la température et températures de vibration.

Figure 6. Evolution of the temperature and vibration temperatures.

tions chimiques n'auront pas le temps d'évoluer en raison de la grande vitesse des particules fluides. C'est un état hors équilibre chimique. Le même phénomène est observé pour les autres espèces chimiques constituant le mélange. La température de translation-rotation T , à la sortie de la tuyère, est supérieure dans le cas réactif (1554 K) par rapport au cas d'un écoulement isentropique (500 K). Cette augmentation est due à la recombinaison des espèces chimiques dans le divergent de la tuyère. Les températures de vibration des molécules de O₂ et de N₂ à la sortie de la tuyère, sont supérieures à la température T . Cette différence, due au figeage de l'énergie de vibration, donne par conséquent un état hors d'équilibre vibrationnel (figure 6). Les valeurs des températures à la sortie de la tuyère sont respectivement :

$$T = 1554 \text{ K}, \quad T v_{\text{O}_2} = 1837 \text{ K}, \quad T v_{\text{N}_2} = 2669 \text{ K} \quad (35)$$

7. COMPARAISON ENTRE LES DEUX MODÈLES

La figure 7 montre l'évolution de la température de translation-rotation T pour les deux modèles, à 3 et 17 réactions. Pour le modèle à 17 réactions elle est supérieure de 14% par rapport au modèle à 3 réactions chimiques (1781 K au lieu de 1554 K). La figure 8 montre l'effet du choix du modèle sur les fractions massiques ; la fraction massique de O₂ par exemple, est de 10,32% dans le modèle à 17 réactions au lieu de 8,13% pour le modèle à 3 réactions, soit une augmentation de 27%. Pour O, on constate à peu près le même écart. La figure 9

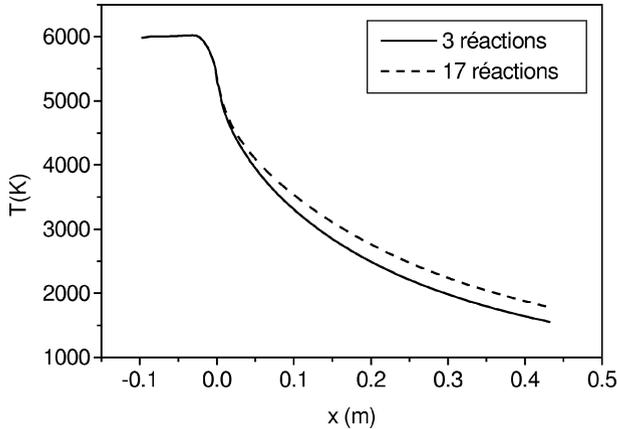


Figure 7. Évolution de la température T pour 3 et 17 réactions.
Figure 7. Evolution of temperature for 3 and 17 reactions.

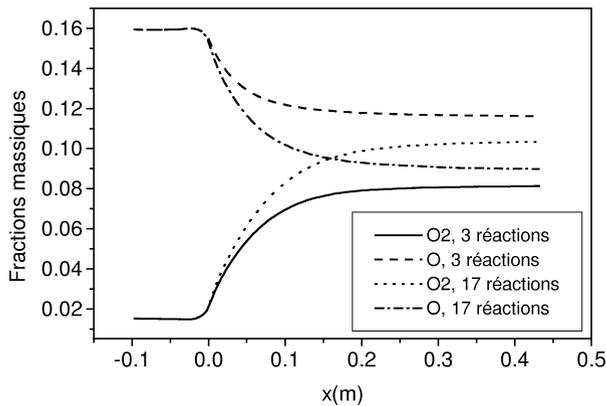


Figure 8. Évolution des fractions massiques pour 3 et 17 réactions.

Figure 8. Evolution of mass fractions for 3 and 17 reactions.

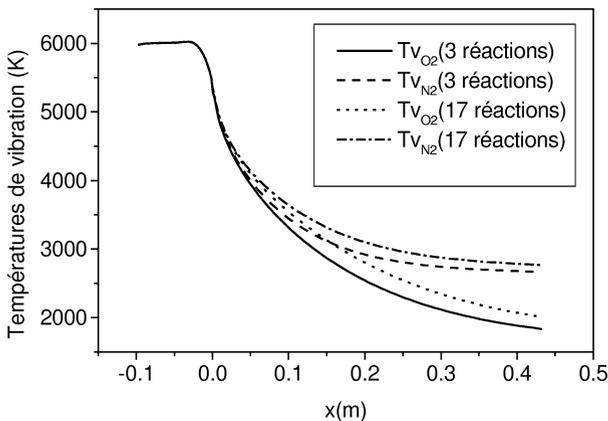


Figure 9. Évolution des températures de vibration pour 3 et 17 réactions.

Figure 9. Evolution of vibration temperatures for 3 and 17 reactions.

montre l'effet du choix du modèle sur les températures de vibration des molécules de O_2 et de N_2 . La différence des températures de vibration entre les deux modèles est du même ordre de grandeur que la différence entre les températures de translation-rotation. La différence entre les deux modèles est très claire dans la zone de déséquilibre thermo-chimique. Par contre dans la partie convergente où la vitesse de l'écoulement est faible, l'air est en quasi-équilibre vibrationnel et chimique, la différence entre les deux modèles n'apparaît pas.

8. CONCLUSION

La simulation numérique des écoulements dans les tuyères à haute température a donné des résultats satisfaisants des points de vue numérique et physique. La convergence du code de calcul élaboré a eu lieu avec une grande précision, et les phénomènes physiques envisagés sont bien visibles à la sortie de la tuyère. Le choix du modèle cinétique dans ce genre d'écoulements est intéressant. En équilibre chimique, dans le convergent pour notre cas, les deux modèles testés donnent le même résultat. En revanche, la différence est non négligeable lorsqu'il s'agit d'un écoulement hors d'équilibre thermo-chimique. Cette différence est très claire dans le reste de la tuyère. Le modèle à 17 réactions s'avère plus réaliste puisqu'il tient compte pratiquement de toutes les collisions possibles entre molécules et atomes du mélange constituant l'air. Dans le divergent, l'air est dans un état hors d'équilibre vibrationnel et chimique, puis il devient figé jusqu'à la sortie de la tuyère. Il est donc important de connaître les grandeurs de l'écoulement et la composition du mélange à la sortie de ces tuyères, là où des maquettes seront installées. Pour ce qui est de l'application du code aux écoulements autour d'obstacles, il serait intéressant de tester les deux modèles aussi. Que ce soit dans des configurations internes ou externes, les deux modèles pourraient être appliqués à des écoulements visqueux, afin de voir leur influence notamment au niveau des couches limites.

RÉFÉRENCES

[1] Burtschell Y., Performances, dimensionnement et simulation numérique d'une soufflerie hypersonique à choc réfléchi à piston libre, Thèse de Doctorat, Université d'Aix-Marseille I, France, 1990.

[2] Druguet M.-C., Contribution à l'étude des écoulements eulériens hypersoniques en déséquilibre thermo-chimique, Thèse de Doctorat, Université de Provence, France, 1992.

[3] Landau L., Teller E., Theory of sound dispersion, *Phys. Z. Sowjet.* 10 (1936) 34-43.

[4] Blackman V., Vibrational relaxation in Oxygen and Nitrogen, Technical Report, Palmer Phys. Laboratory, Princeton Univ., 1955.

[5] Wray K.L., Shock tube study of the vibrational relaxation of Nitric Oxide, *J. Chem. Phys.* 36 (10) (1962) 2597-2603.

[6] Gardiner W.C., *Combustion Chemistry*, Springer-Verlag, New-York, 1984.

[7] Lee S.H., Electron impact vibrational excitation in the flow field of aeroassisted orbital transfer vehicles, *Prog. Astronautics and Aeronautics, Thermophys. Aspects of Re-entry Flows* 103 (1986) 197-224.

[8] Kiefer J.H., Lutz R.W., The effect of Oxygen atoms on the vibrational relaxation of Oxygen, in: 11th Symposium on Combustion, Pittsburg, 1967, pp. 67-74.

[9] Breshears W.D., Bird P.F., Effects of Oxygen atoms on the vibrational relaxation of Nitrogen, *J. Chem. Phys.* 48 (10) (1968) 4768-4773.

[10] Thivet F., Modélisation du déséquilibre vibrationnel dans un écoulement réactif, Rapport d'Activité, Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion, CNRS/ECP, Septembre-Décembre 1989.

[11] Goudjo A., Désidéri J.A., Un schéma de volumes finis décentré pour la résolution des équations d'Euler en axisymétrique, Rapport de Recherche INRIA 1005, 1989.

Abridged English version

Chemical and vibrational nonequilibrium flow in a hypersonic axisymmetric nozzle

Starting from an initial composition of 21% O₂ and 79% N₂, the air is considered as a gas composed of five species, O₂, N₂, NO, O and N. At the inlet of the nozzle, we assume high enthalpy conditions generated by the reflection of a shock wave at the end of a shock tube. Because of the small velocity in the converging part of the nozzle, the air is in thermo-chemical equilibrium, where the composition of the mixture is function of the temperature and the pressure. However, in the remaining of the nozzle and during the expansion, the temperature decreases, the flow quits progressively the equilibrium state, and the reactions become slower. We have a nonequilibrium flow. Finally, reaction rates become very small, the species production by chemical reactions is negligible: the flow is frozen and we are back to the usual flow situation, where the air behaves as a perfect gaz. The Euler non-linear partial differential equations are solved under an explicit form by an unsteady method. The time being considered as an iterative parameter, and an important number of iterations is necessary to obtain the stationary state.

Concerning the reaction rates, we use the Arrhenius formulation, and for the vibrational nonequilibrium, we use the Landau-Teller model, with a vibration relaxation time given by Blackman. The nozzle is composed of a 45° conical converging part connected to a circle arc with a radius equal to that of the throat, and of a 10° conical diverging part. The stagnation pressure and temperature are respectively 100 bars and 6000 K, corresponding to the following mass fractions in an equilibrium state:

$$Y_{O_2} = 1.51\%, \quad Y_{N_2} = 73.64\%, \quad Y_{NO} = 7.70\% \\ Y_O = 15.92\% \quad Y_N = 1.23\%$$

The grid is composed of (150 × 10) nodes. In the computational domain, the program converges after 4000 iterations for a flow without chemistry, and 100 times more for a real flow. The residue of the relative variation of the density is about 10⁻⁸. Chemical and vibrational nonequilibrium is significant in the diverging part. Moreover, the freezing of the concentrations is effective, because the recombination is slow in comparison with the flow velocity. The vibrational energy is also out of equilibrium, and the vibrational temperature of N₂ is higher than the translation-rotation temperature and freezes before the vibrational temperature of O₂. 17 reactions are taken into account, 15 dissociation reactions and 2 exchange reactions, and a comparison is made with a simpler model including only 3 reactions. The evolution of the translation-rotation temperature for the two models, shows that this temperature is higher for the 17-reaction model than for the 3-reaction model, and is the same for the O₂ concentration. The vibration temperature is also slightly affected by the choice of the model.

In conclusion, the present reactive flow simulation in a hypersonic nozzle gives satisfactory numerical and physical results. The important observation is that the two models give the same results in the chemical equilibrium. The convergence of the computational code possesses a high accuracy and the physical phenomena are well illustrated in the diverging part of the nozzle. We point out that the flow in the nozzle is not in equilibrium state and this must be taken into account in the computation of this flow around a model placed at the outlet of the nozzle.